

*National Academy of Sciences of Ukraine*  
**Institute of Applied Physics**



---

---

**ANNUAL REPORT – 2011**

---

---



*Adress:* 58 Petropavlivska St., 40000 Sumy, Ukraine

*Phone:* +38 (0542) 22-27-94

*Fax:* +38 (0542) 22-37-60

*e-mail:* [ipfmail@ipfcentr.sumy.ua](mailto:ipfmail@ipfcentr.sumy.ua)

*web-page:* [iap.sumy.org](http://iap.sumy.org)

***Sumy 2012***



*Institute of Applied Physics*  
*National Academy of Sciences of Ukraine*

---

---

**ANNUAL REPORT – 2011**

---

---

*Sumy 2012*

## CONTENTS

Reference.....	4
Institute of Applied Physics' Directorate.....	5
Research Departments.....	6
experiential BASE.....	23
INNOVATION PRODUCTS OF IAP NAS of Ukraine,.....	26
Training of scientific personal at IAP NAS of Ukraine.....	32
International cooperation.....	33
Abstracts of works.....	34

## REFERENCE

The Institute of Applied Physics (IAP), National Academy of Sciences of Ukraine (NAS of Ukraine), was established in 1991 on the base of the Sumy branch of the Institute of Metallophysics to enlarge the fundamental and applied investigations in nuclear technology. IAP NAS of Ukraine is a part of the Department of Nuclear Physics and Power Engineering, NAS of Ukraine.

The main areas of research:

- Studies of low-energy ion and electron interactions with matter;
- Development of electrostatic accelerator-based instrumentation for analysis of material structure and composition with submicron lateral resolution;
- Molecule radiation biophysics;
- Development of Equipment for Education and Research.

Unique experimental base of the IAP allows to launch cross-subject research and development in education, environmental science, medicine. Research development of nuclear medicine (including advanced high efficient nuclear methods of nuclear diagnosis and cardiovascular and oncological disease treatment), nuclear forensics, nuclear technologies for nanotechnologies.

The staff amounts to 216 persons. Investigations are performed by 129 researchers including 1 academician of NAS of Ukraine, 3 corresponding members of NAS of Ukraine, 10 Doctors of Science and 43 PhDs.

Academic staff is trained in a postgraduate study and a doctorate by the following specialities:

01.04.01 –physics of devices, elements and systems; 01.04.02 – theoretical physics; 01.04.16 – physics of particles, nuclei and high energies; 01.04.20 – physics of charged-particle beams; 03.00.02 – biophysics.

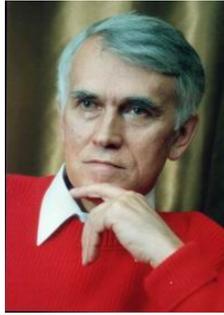
A specialized Board of Studies on theses defence works at the IAP by the following specialities: 01.04.02 – theoretical physics; 01.04.20 – physics of charged-particle beams.

In cooperation with Makarenko Sumy Pedagogical University the IAP has established an Institute of Applied Physics profile chair of advanced physical sciences for young skilled experts to be trained.

The Interagency Board of Studies on Scientific Instrument Making chaired by academician V.Yu. Storizhko is working on the basis of the IAP.

The Institute of Applied Physics NAS of Ukraine is a part of science park of Taras Shevchenko National University of Kyiv.

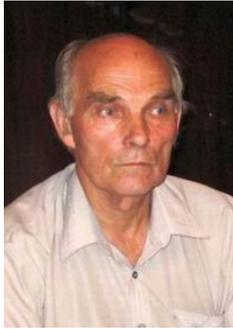
**INSTITUTE OF APPLIED PHYSICS' DIRECTORATE**



***Director***

DSc, Academician of NAS of Ukraine  
**Storizhko Volodymyr Yu.**

ipfmail@ipfcentr.sumy.ua  
+38 (0542) 22-27-94



***Deputy Director for Science***

DSc, Associate Member of NAS of Ukraine  
**Myroshnichenko Valentyn I.**

mvi@ipfcentr.sumy.ua  
+38 (0542) 22-13-67



***Deputy Director for Science***

PhD, Senior Staff Assistant  
**Kholodov Roman I.**

kholodovroman@yahoo.com  
+38 (0542) 22-13-67



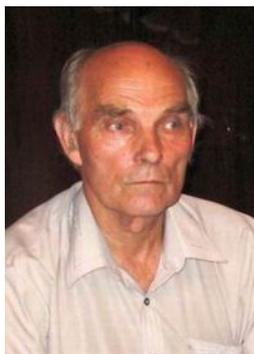
***Academic Secretary***

PhD, Senior Staff Assistant  
**Voroshilo Alexey I.**

voroshilo@ipfcentr.sumy.ua  
+38 (0542) 22-46-08

## RESEARCH DEPARTMENTS

### DEPARTMENT OF ELECTROSTATIC ACCELERATORS



**Head of the Dept.**  
**Corresponding Member of NAS of Ukraine**  
**Myroshnichenko Valentyn I.**

+38 (0542) 22-13-67, mvi@ipfcentr.sumy.ua

#### **The main research areas are**

- Study of non-linear dynamics of MeV ion beams in ion-optical systems, development of probe-forming systems providing beam focusing at a micron and submicron target;
- Study of physical processes in HF ion sources, their application for generation of ion beams of high brightness in ion injectors, optical emission spectrometers, and mass spectrometer of inductively coupled low pressure plasma;
- Study and development of intensive sources of positive and negative ions for ion accelerators and ion technologies; study of these beams interaction with a solid body surface;
- Development of new techniques of protective and strengthening coating for structural materials;
- Study of gas field ion sources for formation of high-brightness ion beams and for construction of field ion injectors.

#### **The main publications**

- Development of the rf ion source for use in accelerator-based microprobes / V. Miroshnichenko, S. Mordyk, D. Shulha [et al.] // Nucl. Instr. And Meth. B. – 2007. – Vol. 260. – P. 39-44.
- Investigation of rf power absorption in the plasma of helicon ion source / Mordyk S., Alexenko O., Miroshnichenko V. [et al.] // Review of Scientific Instruments. – Volume 79. – Issue 2. – P. 02B907-4 (2008).
- Investigation of helicon ion source extraction systems / Mordyk S., Miroshnichenko V., Shulha D., Storizhko V. // Review of Scientific Instruments. – Volume 79. – Issue 2. – P. 02B707-4 (2008).
- High-frequency multicusp ion source / Voznyi V.I., Miroshnichenko V.I., Mordyk S.M. [et al.] // Visnyk SumDU № 1. – 2008. – P. 28-31.
- High-brightness extraction system of the helicon ion source / Shulha D., Mordyk S., Miroshnichenko V. // Problems of atomic science and technology, «Plasma Electronics and New Methods of Acceleration» (7). – 2010. – №4. – P. 369-372.
- Microwave two-mode interferometer for plasma diagnostics / Nahorny D.A., Nahorny A.G. // Pribory i tekhnika eksperimenta. – 2010. – №3. – P.76-79.
- High-brightness RF ion sources for accelerator applications / Voznyi V.I., Miroshnichenko V.I., Mordyk S.M. [et al.] // Science and innovation. – 2010. – V.6, №5. – P. 38-44.
- Ion injector field type / Voznyi V.I., Miroshnichenko V.I., Storizhko V.E. [et al.] // Science and innovation. – 2010. – V.6, №5. – P.72-76.

**Lab of Direct Accelerators and Ion Implantation and Modification of Nuclear Materials**



**Head of the Lab  
PhD, senior research assistant  
Baturin Volodymyr A.**

+38 (0542) 33-22-50, baturin@ipflab.sumy.ua



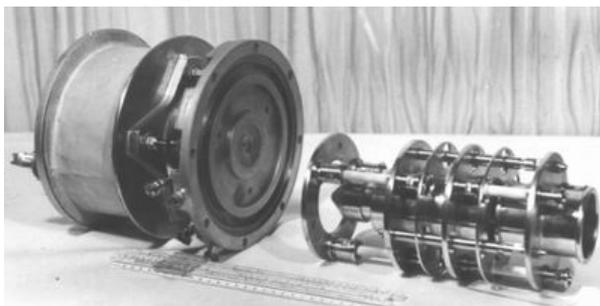
*Lab staff (left to right): Duvanov S.M., Pustovoitov S.O., Nahornyi A.H., Karpenko O.Yu., Lunika M.M., Baturin V.A., Shumylo V.P Yeriomin S.O., Lytvynov P.O., Nahornyi V.A., Golubovkii B.H., Shimko A.I.*



*High-dose ion implanter*



*High-intensity ion source testing equipment*



*Positive ions source*



*H- Ion Source with the volume-plasma formation of ions (cesium-free)*



*High-frequency magnetron sputtering facility*



*The electron-beam unit*

### **The main research areas are**

- Ion implantation and modification of surface layers;
- Development and study of intensive sources of positive and negative ions for ion accelerators and ion technologies;
- Development of intensive ion sources and equipment for ion accelerators and technologies;
- Interaction of high-energy ions and electrons with a surface;
- Development of new techniques of protective and strengthening coating for reactor materials;

### **The main publications**

- Ievtushenko, V. Karpyna, G. Lashkarev, V. Lazorenko, V. Baturin, A. Karpenko, M. Lunika / The structure and morphology of the ZnO films, deposited by RF Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Si by magnetron sputtering // *Metalofiz.Noveishie Tekhnol.*- 2008, V. 30, p. 631-641.
- Ievtushenko, V. Karpyna, G. Lashkarev, V. Lazorenko, V. Baturin, A. Karpenko ... / The structure of ZnO multilayer films, deposited by magnetron sputtering // *Metalofiz.Noveishie Tekhnol.*- 2008, V. 30, № 11, p. 1511 – 1519.
- P.A. Litvinov, V.A. Baturin / Development H<sup>-</sup> sources for the medicine accelerators // *Belgorod State University Scientific Bulletin, Physics Mathematics*, 2008, № 9 (49), p.160-166.
- G.V. Lashkarev, V.I. Lazorenko, V.A. Karpyna, A.I. Ievtushenko, V.A. Baturin, A.Yu. Karpenko, A.Ya. Dan'ko / Photoluminescence of ZnO films excited by femtosecond laser // *Physics and Chemistry of Solid State* V.9, №2 (2008) P.375-378
- A.Yu. Karpenko, V.A. Baturin / The fast gas valve // Patent, UA 83136, H01J27/02, 200612808 (10.06.2008, Bul. №11, 2008).
- V.A. Baturin, A.Yu. Karpenko / Deposition of thin-film coating with use cluster beam source // *Problem of Atomic Science and Technology, Series "Vacuum, Pure Materials, Superconductors"* 2009, № 6, p. 175 – 180.
- V.A. Baturin, S.A. Eremin / Mass spectrometric research of ion sputtering processes at high primary ion energies // *Zhurnal Nano ta Electronnoi Fizyky*// 2009, V. 1 №1, p.80-103.
- P.A. Litvinov, V.A. Baturin / Discharge system with electron oscillations in the emission region for the positive ions source // *Zhurnal Nano ta Electronnoi Fizyky*// 2009, V. 1 №2, p.55-59.
- V.A. Baturin, A.Yu. Karpenko P.A. Litvinov, S.A. Pustovoitov. / The electromagnetic valve for adjustable pulse gas inlet // *Applied Physics*, 2010, № 1 p.125 - 129.
- V.A. Baturin, P.A. Litvinov, S.A. Pustovoitov, A.Yu. Karpenko / Emission Characteristics of H<sup>-</sup> Ion Source with Inverse Gas Magnetron Geometry // *Rev. Sci. Instrum.* 81, 02A710 (2010).
- A.I. Ievtushenko, V.A. Karpyna, V.I. Lazorenko, G.V. Lashkarev, V.D. Khranovskyy, V.A. Baturin, O.Y. Karpenko, M.M. Lunika, K.A. Avramenko, V.V. Strelchuk, O.M. Kutsay / High quality ZnO films deposited by radio-frequency magnetron sputtering using layer by layer growth method // *Thin Solid Films*, Vol. 518, №16, pp. 4529–4532 (2010).

**Lab. of Non-linear Dynamics of Ion Beams**



**Head of the Lab.  
DSci, senior research assistant  
Ponomarev Oleksandr G.**

+38 (0542) 33-30-18, a\_g\_ponomarev@pochta.ru



*Lab staff (left to right): Saiko M.O., Mel'nyk S.S., Ponomarev O. G., Rebrov V.A., Magilin D.V., Kravtsova N.I., Kolin'ko S.V., Ponomarev A.O.*

**The main research areas are**

- Study of impurity segregation at boundaries of grains and welded joints of structural materials;
- Study of non-linear dynamics of ion beams in immersion probe-forming systems for compact nuclear microprobe of new generation to be constructed.
- Development and extension of a p-beam writing channel for samples irradiation by individual ions;
- Development of magnet qudrupole lens of new type and their diagnostic technique;
- Study of non-linear dynamics of ion beams in probe-forming systems in modes of high flux density and individual ions;
- Joint study and development with the Joint Institute for Nuclear Research (JINR), Dubna, the Russian Federation within “Protocol”, particularly an elemental analysis of structural materials with nuclear and physical methods; elaboration of technical and economical reasoning for nanoanalytical center based on electrostatic accelerator EG-5 for development and research in nanotechnology; development of microanalytic ion beam techniques with electrostatic accelerator.

**The main publications**

- Storizhko V.E. The Sumy scanning nuclear microprobe: design features and first tests / V.E. Storizhko, A.G. Ponomarev, V.A. Rebrov, A.I. Chemeris, A.A. Drozdenko, A.B. Dudnik, V.I. Miroshnichenko, N.A. Sayko, P.A. Pavlenko, and L.P. Peleshuk // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2007. – Vol. 260. – P. 49-54.

- Rebrov V.A. The new design of magnetic quadrupole lens doublet manufactured from a single piece / V.A. Rebrov, A.G. Ponomarev, V.K. Palchik, N.G. Melnik // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2007. – Vol. 260. – P. 34-38.
- Sayko N.A. The beam scanning control and data acquisition at the Sumy nuclear microprobe / N.A. Sayko, A.G. Ponomarev, A.A. Drozdenko // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2007. – Vol. 260. – P. 101-104.
- Ponomarev A.G. The Beam Control in Quadrupole Probe-Forming Systems with Allowance of Correlation between Angular Distribution and Energy Spread of Charged Particles / A.G. Ponomarev, V.I. Miroshnichenko, V.E. Storizhko // Physics Procedia. – 2008. Vol. 1. - P. 99-104.
- Melnik K.I. Optimization of the working distance of an ion microprobe-forming system / K.I. Melnik, D.V. Magilin, A.G. Ponomarev // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2009. – Vol. 267. – P. 2036-2040.
- Ponomarev A.A. Influence of the beam current density distribution on the spatial resolution of a nuclear microprobe / A.A. Ponomarev, V.I. Miroshnichenko, A.G. Ponomarev // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2009. – Vol. 267. – P. 2041-2045.
- Magilin, A.G. Ponomarev, V.A. Rebrov, N.A. Sayko, K.I. Melnik, V.I. Miroshnichenko, V.Y. Storizhko Performance of the Sumy nuclear microprobe with the integrated probe-forming system // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2009. – Vol. 267. – P. 2046-2049.
- Ponomarev A.G. Optimal Collimation of a Charged Particle Beam in Probe-Forming Systems/ A.G. Ponomarev // Technical Physics. – 2009. Vol. 54, No. 2. – P. 276–280.
- Vorobjov G.S. Application of focused charge-particle beams in manufacturing of nanocomponents / G.S. Vorobjov, A.G. Ponomarev, A.A. Ponomareva, A.A. Drozdenko, A.A. Rybalko // Telecommunications and Radio Engineering. –2010. – Vol. 69, No.4. – P. 355-365.
- Ponomarev A.G. Nonlinear processes of probe formation of a beam with inhomogeneous phase density at nuclear microprobe / A.G. Ponomarev, A.A. Ponomarev, V.I. Miroshnichenko // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2011. – Vol. 269. – P. 2197-2201.
- Ponomarova A.A. One-stage probe-forming systems with quadrupole lenses excited by individual power supplies / A.A. Ponomarova, K.I. Melnik, G.S. Vorobjov, A.G. Ponomarev // Nucl. Instr. and Meth. B. – 2011.- Vol. 269. – P. 2202-2205.



**Head of the Dept.  
PhD Danyl'chenko Serhii M.**

+3 (0542) 33-30-89, danil@ipflab.sumy.ua



*Department staff (left to right): Stanislavov O.S., Illiashenko V.Yu Yanovs'ka A.A Pavlenko P.A., Sukhodub L.F., Danyl'chenko S.M., Kovalchuk V.M., Moskalenko V.B.*



*Mass-spectrometer FAB*



*Mass-spectrometer PDMS*



*Scanning Electron Microscopy*

### **The main research areas are**

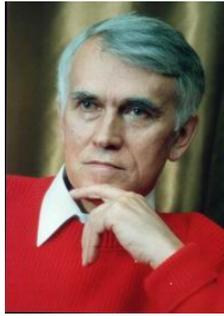
- Radiation biophysics
- Fundamental and experimental study of thermodynamic stability of biological clusters as main structural elements of DNA and RNA.
- Study of ionization processes in mass-spectrometric techniques.
- Study of adducts (interaction products) of some medical products and DNA and their components.

### **The main publications**

- *Danylchenko S.N., Kukhareno O.G., Moseke C. et al.* Determination of the Bone Mineral Crystallite Size and Lattice Strain from Diffraction Line Broadening // *Cryst. Res. Technol.* - 2002.-V.37, №11.- P.1234-1240.

- *Danilchenko S.N., Moseke C. Sukhodub L.F. et al. X-Ray Diffraction Studies of Bone Apatite under Acid Demineralization // Cryst. Res. Technol. - 2004.- V. 39, №1.- P. 71-77.*
- *Danilchenko S.N., Pokrovskiy V.A., Bogatyrov V.M. et al. Carbonate location in bone tissue mineral by X-ray diffraction and temperature-programmed desorption mass spectrometry // Cryst. Res. Technol. - 2005.- V. 40.- P. 692–697.*
- *Danilchenko S.N., Kulik A.N., Buhay O.M., Pavlenko P.A., Kalinichenko T.G., Ul'yanchich N.V., and Sukhodub L.F. Determination of the content and localization of magnesium in bioapatite of bone. // Journal of Applied Spectroscopy - 2005 V.72, №6. - P. 899-905.*
- *Danilchenko S.N., Koropov A.V., Protsenko I.Yu., Sulkiio-Cleef B., and Sukhodub L.F Thermal behavior of biogenic apatite crystals in bone: An X-ray diffraction study // Cryst. Res. Technol. - 2006.-V.41, №3.-P.268-275.*
- *Danilchenko S.N., Kulik A.N., Pavlenko P.A., Kalinichenko T.G., Buhay A.N., Chemeris I.I., and Sukhodub L.F. Thermoactivated removing of magnesium from bioapatite crystals: an atomic-absorption spectrometry and X-ray electron probe microanalysis study. // Journal of Applied Spectroscopy. - 2006-V.73, №3. - P. 385-391.*
- *Kalinkevich O.V., Sklyar A.M., Danilchenko S.N., Kindya V.I., Kalinkevich O.V., Sukhodub L.F. Production of composite biomaterials for medical application on the basis of chitosan from Blakeslea trispora industrial waste. // Journal of Biotechnology, 1365 (2008) S402-459, V4-P-120.*
- *Danilchenko S.N., Protsenko I.Yu., and Sukhodub L.F. Some features of thermo-activated structural transformation of biogenic and synthetic Mg-containing apatite with  $\beta$ -tricalcium-magnesium phosphate formation. // Cryst. Res. Technol. 2009.-V.44, p.553-560.*
- *Danilchenko S.N., Kalinkevich O.V., Pogorelov M.V. et al. Chitosan-hydroxyapatite composite biomaterials made by one step co-precipitation method: preparation, characterization, and in vivo tests. // Journal of Biological Physics and Chemistry, 2009, V.9, p.119-126.*
- *Danilchenko S.N., Kalinkevich O.V., Kuznetsov V.N., Kalinkevich A.N., Kalinichenko T.G., Poddubny I.N., Starikov V.V., Sklyar A.M., and Sukhodub L.F. Thermal transformations of the mineral component of composite biomaterials based on chitosan and apatite // Cryst. Res. Technol. – 2010. – V. 45, P. 685-691.*
- *Danilchenko S.N., Kalinkevich O.V., Pogorelov M.V., Kalinkevich A.N., Sklyar A.M., Kalinichenko T.G., Ilyashenko V.Y., Starikov V.V., Bumeyster V.I., Sikora V.Z., Sukhodub L.F., Characterization and in vivo evaluation of chitosan-hydroxyapatite bone scaffolds made by one step co-precipitation method // Journal of Biomedical Materials Research: Part A, 2011, 96A: P.639–647.*
- *Yanovska A.A., Kuznetsov V.N., Stanislavov A.S., Danilchenko S.N., Sukhodub L.F. Synthesis and characterization of hydroxyapatite-based coatings for medical implants obtained on chemically modified Ti6Al4V substrates // Surf. Coat. Technol. 2011, V.205 (23-24), P.5324-5329.*

**DEPARTMENT OF NUCLEAR AND PHYSICAL  
RESEARCH**



**Head of the Dept.  
Academician of NAS of Ukraine  
Storizhko Volodymyr Yu.**

+38 (0542) 22-27-94, ipfmail@ipfcentr.sumy.ua



*Group of atom and nuclear research (left to right): Buhay O.M., Kramchenkov A.B., Drozdenko M.O., Kravchenko S.M., Vnuchenko A.O., Denysenko V.L Peregudov O.M.*

### **The main research areas are**

- Study of interaction of ions and MeV electrons with a substance.
- Development of nuclear and physical methods of submicron resolution for material content and structure study.
- Construction of electron appliances and experimental equipment for analytical facility.

### **The main publications**

- A.A.Drozdenko, S.M.Duvanov, S.N.Mordyk, V.E.Storizhko. New ion elastic scattering beam line of analytical complex at iap NAs Ukraine // Problems of Atomic Science and Technology, series «Nuclear physics research» №3, 2008, p.105-109.
- A.A.Drozdenko, V.L.Denysenko, A.B.Dudnik, M.I.Zaharets, V.V.Kuprienko, N.A.Sayko, V.E.Storizhko. An RBS end-station with high energy resolution // Visnyk of the Sumy State University, №2, 2008, p. 60.
- I.G.Ignat'ev, V.I.Miroshnychenko, A.M.Sirenko, V.E.Storizhko. Suppression of radiation from 2 MV electrostatic accelerator // Nuclear physics and power engineering, 2008, №3 (25), p. 90-93.
- A.B.Kramchenkov, A.A.Drozdenko, M.I.Zaharets, D.I.Kurbatov, A.S.Opanasiuk. Investigation of thin films by means of high-resolution RBS // Physics of metals and novel technologies, 2008, v 30, special issue, p. 153-158.
- A.B. Kramchenkov, D.I.Kurbatov, M.I.Zaharets, A.S.Opanasiuk. Investigation of oxygen content in ZnS thin films by means of RBS // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2010, №3, p. 45-47.
- L.G.Shabel'nikov, V.L.Denysenko, M.V.Ill'yashenko, V.E.Storizhko, A.A.Drozdenko, S.A.Vershinskiy. A project of a quasimonochromatic X-ray source, based on proton accelerator, with X-ray optic system // Physics of metals and novel technologies, 2010, v 32, p. 1-12.

- V.E.Storizhko, M.V.Ill'yashenko, V.B.Molodkin, A.Yu.Gayevskiy, V.L.Denysenko, O.I.Denysenko, S.A.Vershinkiy. Ways of X-rays focusing // Success in physics of metals, 2010, v. 11, p. 1-17.
- S.A.Vershinskiy, A.G.Ponomarev, V.E.Storizhko, V.L.Denysenko, M.V.Ill'yashenko. Optimisation of ion-optical system for a quasimonochromatic X-ray source based on an electrostatic accelerator // Nuclear physics and power engineering, 2010, v. 11, №2, p. 195-198.
- A.B.Kramchenkov, V.E.Storizhko, A.A.Drozdenko, V.L.Denysenko, H.D.Carstanjen. ERDA facility for investigation of hydrogen in metals // Science and innovations, 2010, v. 6, №5, p. 32-37.
- O.N. Peregudov, O.M. Buhay. Calculation of the Areas of Peaks in Measurements of Isotopic Ratios Using MI1201SG Mass Spectrometer // International Journal of Mass Spectrometry, 2010. V.295, pp. 1-6.

**DEPARTMENT OF QUANTUM ELECTRODYNAMICS OF  
STRONG FIELDS**



**Head of the Dept.  
DSci, professor Roshchupkin Sergei P.**

+38 (0542) 22-45-01, [rsp@roshchupkin.sumy.ua](mailto:rsp@roshchupkin.sumy.ua)



*Department staff (left to right): Denisenko O.I., Starodub S.S., Tsybul'nik V.A., Lebed A.A., Levitska O.O., Nedoreshta V.N., Roshchupkin S.P., Voroshil A.I.*

### **The main research areas are**

- Research of interaction between an intensive electromagnetic radiation and a substance, in quantum electrodynamics of strong fields, in particular.
- Study of coherent, non-resonant, and resonant quantum-electrodynamic processes in strong laser and magnetic fields.

### **The main publications**

- S.P. Roshchupkin, and A.I. Voroshilo, Resonant and Coherent Effects of Quantum Electrodynamics in the Light Field (Naukova Dumka, Kiev, 2008), in Russian.
- S.P. Roshchupkin, A.A. Lebed', E.A. Padusenko, A.I. Voroshilo. Resonant effects of quantum electrodynamics in the pulsed light field. Chapter in the Book "Quantum Optics and Laser Experiments", INTECH - Open Access Publisher, University Campus STeP Ri, Croatia, January 2012, PP.107-156.
- S. P. Roshchupkin, A. A. Lebed', E. A. Padusenko, and A. I. Voroshilo. Quantum Electrodynamics Resonances in a Pulsed Laser Field. Laser Physics, 2012, Vol. 22, No. 6, PP. 1113–1144.
- A.A. Lebed', S.P. Roshchupkin "The Influence of a Pulsed Light Field on the Electron Scattering by a Nucleus", Laser Physics Letter, 2008, V.5, No. 6, PP. 437–445.
- S.S. Starodub and S.P. Roshchupkin. "The hydrogen ions attraction effect in the pulsed field of two laser waves propagating in the opposite directions", Laser Physics Letter, 2008, V.5, No. 9, PP.691–695.
- A.A. Lebed' and S.P. Roshchupkin. "Spontaneous bremsstrahlung effect in the nonrelativistic electron scattering by a nucleus in the field of pulsed light wave". Laser Physics Letter, 2009, Vol. 6, No. 6, PP.472-479.

- A.A. Lebed' and S.P. Roshchupkin. "Nonresonant spontaneous bremsstrahlung by a relativistic electron scattered by a nucleus in the field of pulsed light wave". The European Physical Journal D 53, 2009, PP.113–122.
- S.P. Roshchupkin and V.A. Tsybul'nik. "Anomalous amplification of electromagnetic field in the course of the nonrelativistic electron scattering by ion in the moderate-strong light field". Laser Physics Letter, 2009, Vol. 6, No. 12, PP. 906-911.
- Lebed' A.A., Roshchupkin S.P. "Resonant spontaneous bremsstrahlung by an electron scattered by a nucleus in the field of a pulsed light wave". Physical Review A. 2010, Vol.81, 033413–P.1-13.
- S. S. Starodub and S. P. Roshchupkin. "Heavy Nuclei Confinement Effect in a Pulsed Light Field", Laser Physics, 2011, Vol. 21, No. 4, pp. 769–773.

**Lab of Quantum Electrodynamics of Strong magnetic Fields, Dept of Quantum  
Electrodynamics of Strong Fields**



**Head of the Lab  
PhD, Senior Staff Assistant  
Kholodov Roman I.**

+38 (0542) 22-13-67, kholodovroman@yahoo.com



*Lab staff: Kholodov R.I., Kravchenko S.M., Kul'ment'ev A.I., Novak O.P., Lul'chenko S., Vechircka V., Ostapovich D., Khelemelya O.P., Dyachenko M.M.*

**The main research areas are**

- Study of QED phenomena in resonant and non-resonant conditions in strong magnetic fields, particularly at collision of quick heavy ions and nuclei.
- Study of interaction of a heavy charged particle with electron magnetized gas with quantum field theory methods by means of dielectric model of plasma physics and in pair collision model.
- Computer modeling of the processes occurring when charged particle beams and particles beams collide with a matter.

## **The main publications**

- *Fomin P.I., Fomina A.P.* On the evolution and the characteristic times of the relativistic jet activity of quasars and radio galaxies // *Kinematics and physics of celestial bodies*, V. 23, № 6, P. 381-386, (2007).
- *Fomin P.I.* On the vacuum condensates and the problem of the nature of mass and inertial forces // *Collection of Scientific Papers: Problems of Modern Physics*, Chap. Ed. Shulga N.F., Kharkov: NSC KIPT, P. 367-374, (2007).
- *Koropov A.V.* Morphological stability of islands of small size in the deposition of material on the surface of the crystal // *Zhurnal-fizika-tverdogo-tela*. V. 50, № 11., P. 2093-2097., (2008).
- *Novak O.P., Kholodov R. I.* Spin-polarization effects in the processes of synchrotron radiation and electron-positron pair production by a photon in a magnetic field // *Phys. Rev. D*, 80, № 2, 025025-1 – 025025-11 (2009).
- *Novak O.P., Fomin P.I., Kholodov R. I.* Electron-positron pair production by an electron in a magnetic field near the threshold of the process // *JETP*, V. 137, №6, 1120–1125 (2010).
- *Kul'ment'ev O.I.* Description of the surface of compact nano-objects // *Mathematic Modeling Journal*, V.23, №4. P.57–68, (2011).

**DEPARTMENT OF PHYSICAL METHODS OF ORE ANALYSIS**



**Head of the Dept.  
DSci, associate professor  
Valter Anton A.**

+38 (044) 525-03-20, avalter@iop.kiev.ua



*At work (left to right): Pysans'kyi A.I., Valter A.A Goniiodska L.S., Chmil V.V.*

**The main research areas are**

- Study and application of products of natural unstable processes resulting in aggregation of valuable natural resources, monoisotopic raw materials, in particular.
- Development and implementation of new technologies for elemental and isotopic ore analysis, nuclear and physical analysis method, in particular.
- Acquisition of new fundamental data on the Earth and Space.

**The main publications**

- Valter A.A., Storizhko V.E., Dikiy N.P., Dovbnya A.N., Lyashko Yu.V., and Berlizov A.N. Nuclear-analytical and mineralogical principles and techniques for prediction and investigation of the native-pure rare isotope occurrence. Problems of atomic science and technology.2005, N6. Series: Nuclear Physics. P. 142-146.
- Valter A.A., Pisansky A.I., Podberezskaya N.V. Crystal-chemical factor of the strength for confinement of radiogenic  $^{187}\text{Os}$  in the structure of molybdenite with rhenium // Reports of NAS of Ukraine. 2007. № 12. – P.107-110.
- Valter A.A., Zalubovskiy I.I., Storizhko V.E., Dikiy N.P., Dovbnya A.N. Achievements in Ukraine in a new direction on the brink of nuclear physics and earth sciences // Visnyk KhNU. Nuclei, Particles, Fields. – 2008. – № 794, V.1(37). – P.21-31.
- Valter A.A. Mineralogical aspects of the existence of very rare isotopes in natural and pure state. Notes of the Ukrainian Mineralogical Society. 2010, V 7. P5-17.
- Andreev A.V., Valter A.A., Dikiy N.P., Dovbnya A.N., Eremenko G.K., Lyashko Yu.V., Pisansky A.I., Storizhko V.E., Uvarov V.L. Pure strontium-87 isotope in rubidium biotite from the Ukrainian shield. Problems of atomic science and technology.2011, N3. Series: Nuclear Physics Investigations. P. 54-59.
- Dikiy N.P., Eremenko G.K., Lyashko Yu.V., Andreev A.V., Pisansky A.I. Rubidium biotite as mineral carrier of pure strontium isotope -87. Reports of NAS of Ukraine, 2011, № 6. P.102-106.

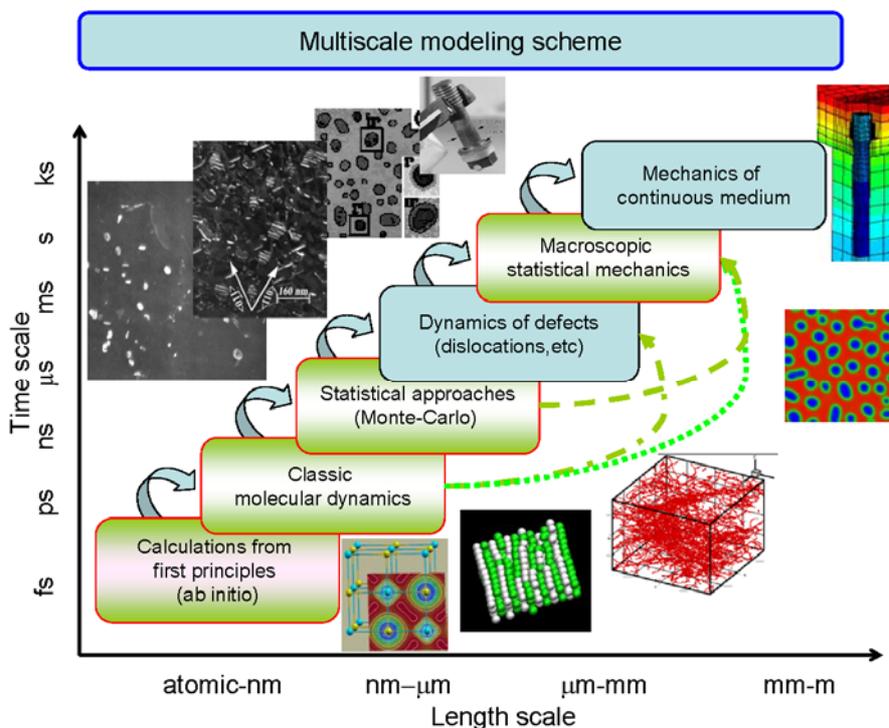
- Khorasanov G.L., Blokhin A.I., Valter A.A. The new heat carrier from the melt lead, enriched with lead-208, and the possibility to obtain it from the thorium-containing ores and minerals for the needs of nuclear power. Preprint of Leypunsky PhEI -3204. Obninsk, 2011, P.23.
- Illyashenko V.Yu., Rogul'sky Yu.V., Buhay O.M., Kulyk O.M. The use of a phenomenological model for the verification of measurement results in the electrothermal atomic absorption spectrometry // Applied Spectroscopy Journal, 2011, V.78, №1, P. 128-133.
- Rogul'sky Yu.V., Buhay O.M., Kulyk O.M., Illyashenko V.Yu. Influence of permanent modifiers on the temperature of graphite furnace analytical zone // Applied Spectroscopy Journal, 2011, V.78, №2, P. 311-315.
- Kulyk O.M., Buhay O.M., Rogul'sky Yu.V., Kalinichenko T.G. The study of tungsten modified graphite furnace of atomic absorption spectrometer by using scanning microscopy // Applied Spectroscopy Journal 2009, V.76., №4, P. 593-598.

**DEPARTMENT OF MODELING OF RADIATION EFFECTS AND MICROSTRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN STRUCTURAL MATERIALS**



**Head of the Dept.  
DSc, Head of the Lab  
Kharchenko Dmitrii O.**

+38 (0542) 22-45-01 [dikh@ipfcentr.sumy.ua](mailto:dikh@ipfcentr.sumy.ua)



**The main research areas are**

- Research on the first principles of electron structure, energy characteristics, boundary parameters of constructional materials with alloying elements and stops able to be flooded.

- Studies of behaviour of point defects, dislocation-vacancy ensemble, and grain boundaries in crystals subjected to radiant flux.
- Investigation of processes of ordering/disordering, phase layering, precipitation and dissolution in crystals subjected to long-term radiant flux, and in processes of annealing and defect structure crystallization.
- Research of structure formation, self-organization of defect structure and unstable processes induced by interaction of high-energy radiation particles and atomic systems of a crystal.
- Investigation of nanostructures formation at a surface of materials subjected to KeV ion bombardment.
- Investigation of nanostructures formation at a surface and in volume of materials during condensation and sputtering.
- Investigation of magnetoelastic coupling effect onto structural materials characteristics.
- Investigation of diffuse growth and morphological stability of phase separation at grain boundary and crystal surface.

### **The main publications**

- *A.I. Olemskoi, D.O. Kharchenko. Self-organization self-similarity stochastic system – Moskow - Izjevsk: Institute of Computer Science, 2007. - 296 p. (in Russian).*
- *Chepurnyh G.K. Areas of extreme characteristics of magnetically ordered crystals – Kiev – Naukova Dumka – 2010. 175 p. (in Russian).*
- *D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, A.V. Dvornichenko. Ordering processes of complex systems. – Kiev – Naukova Dumka, 2011. - 264 p. (in Russian).*
- *A.I. Olemskoi, D.O. Kharchenko. Self-organized criticality within the framework of the variational principles. In: Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems (Ed.by S.Sieniutycz, H.Farkas), Amsterdam, 2005, p.695-716.*
- *A.I. Olemskoi, D.O. Kharchenko. Representations of self-organized criticality. In: Order, Disorder criticality (Ed. By Yu.Holovach), World Scientific, Singapore, 2007, p.181-230.*
- *D.O.Kharchenko, I.O.Lysenko, P.K. Galenko. Fluctuation effects on pattern selection in the hyperbolic model of phase decomposition. In: Stochastic differential equations (Ed.by Nikolaos Halidias) - - Nova Science Publishers, 2011, p.97-127.*
- *D.O. Kharchenko, A.V. Dvornichenko. Phase transitions induced by thermal fluctuations // Eur.Phys.J.B. - 2008. - V.61. - P.95-103.*
- *D.O. Kharchenko, A.V.Dvornichenko. Phase separation in binary systems with internal multiplicative noise // Physica A. - 2008. - V.387. - P.5342-5354.*
- *D.O.Kharchenko, S.V.Kokhan, A.V.Dvornichenko. Noise-induced patterning in reaction-diffusion systems with non-Fickian diffusion // Physica D. - 2008. - V.238. - P.2251-2260.*
- *E.D. Belokolos, V.O. Kharchenko, D.O. Kharchenko. Chaos in a generalized Lorenz system// Chaos, Solitons and Fractals - 2009. - V.41. - P.2595-2605.*
- *D.Kharchenko, I.Lysenko, V.Kharchenko. Noise induced patterning in periodic systems with conserved dynamics //Physica A. - 2010. - V.389. - P. 3356-3367.*

**RESEARCH CENTER OF EQUIPMENT FOR  
EDUCATION AND RESEARCH**



**Head of The Research Centre  
PhD, associate professor  
Lopatkin Roman Yu.**

+38 (0542) 60-45-38  
l\_rom@mail.ru



*At work (left to right): Lopatkin R.Yu., Ignatenko S.M., Kolesnik M.I.*

**The main research areas are**

- Implementation of scientific and technical policy in construction and production of equipment for education and research.
- Formation and implementation of programmes on development and production of equipment for education and research.
- Coordination of development and implementation of modern models of equipment for education and research at secondary, vocational schools and high educational establishments, research institutes of National Academy of Sciences of Ukraine and other branch academies.
- Research works and development of new generation models of equipment for education and research.

**The main publications**

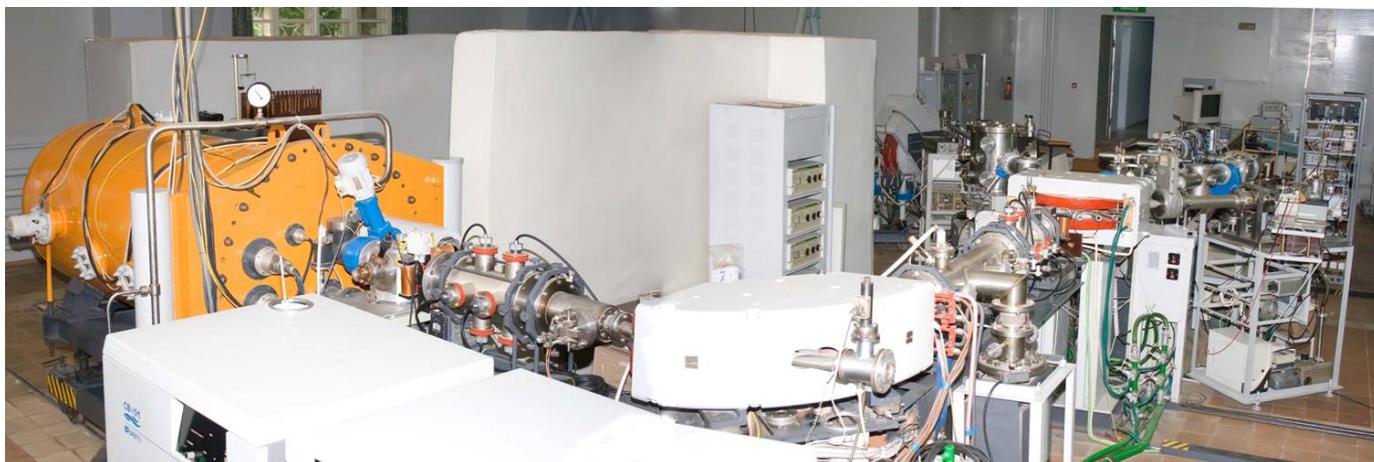
- L.A. Sobko Improving the effectiveness of technology of trimming details processing with high surface hardness / L.A. Sobko, I.G. Chizhov, O.V. Zaporozhets // Compressor and power engineering. – 2007. - №3 (9). - C. 40 – 41.
- M.I. Kolesnik Equipmen of physics, chemistry and biology classrooms / M.I. Kolesnik // Innovative technologies and features of physics, chemistry and biology education in a school or in an institute of higher education: int. theoretical and practical conf., 12 - 13 Apr, 2007. : abstracts – Astrakhan, 2007. - pp. 39 - 45.
- R.Yu. Lopatkin Architecture of hardware-software complex for educational experiment / R.Yu. Lopatkin, A.V. Sineok, B.B. Куприенко // Modern physical workshop: conference., 23-25 Sept., 2008: abstracts. - Astrakhan, 2008. - pp. 89 – 90.
- M.I. Kolesnik. Activization of schoolchildren explanatory activity during implementation of educational experiment with laboratorial kit «Mechanics» / M.I. Kolesnik, O.M. Sokolyuk // Information technologies and training aids. - 2009. - № 2. – Access: <http://www.ime.edu-ua.net/em11/emg.html>.

- R.Yu. Lopatkin, V.V. Kuprienko, S.M. Ignatenko, R.L. Pelepey, V.A. Ivashchenko Universal equipment for computerization of scientific and educational experiment // Science and innovations - 2010. - Vol.6, №5. - pp. 55 – 59.
- O.V. Zaporozhets, V.F. Shkurdoda, O.N. Peregudov, V.K. Zaporozhets Desk-size mass spectrometer based on permanent magnets // Device and experimental technique. - # 5. – 2010. - pp. 103-108.
- M.I. Kolesnik. System of measuring means for modern scholastic classrooms of physics. // Modern educational equipment: innovations, technologies, experience: All Ukrainian theoretical and practical conf., 25-26 Feb 2010: abstract. – Sumy, 2010. – pp. 41 – 42.
- M.I. Kolesnik., O.M. Sokolyuk Implementation of complex approach in educational environment through information computer technologies // Collected papers of VI international conference «New informational technologies in education for all: scientific environments». Ed. By. V.I. Gritsenko — Kyiv.-pp.405-411.
- R.Yu. Lopatkin, V.A. Ivashchenko, V.V. Kuprienko. Organization of remote physical experiment by the instrumentality of a universal hardware-software complex / R.Yu. Lopatkin [et al.] // Control Systems and Computers). - 2011. - №5. - pp. 73-75, 85. - bibliography.: p. 85 (11 names).
- R.Yu. Lopatkin, V.A. Ivashchenko, V.V. Kuprienko Simulation of decentralized computer network IMMOD-2011. Simulation. Theory and practice. Materials of conference Vol 2. Section 3. Practical application of simulation and complex modeling and design automation tools.— St.-Petersburg: 2011.—pp.142-144.

## EXPERIMENTAL BASE

### MICROANALYTICAL FACILITY

- Ion luminescence channel, resonant nuclear reactions channel; scanning microprobe channel with 2  $\mu\text{m}$  spatial resolution; RBS, PIXE, PIGE channels; ERDA channel with electrostatic spectrometer; X-ray quasimonochromatic source



*Microanalytical facility*



*Channels*

## HIGH-SENSITIVITY HVEE ISOTOPE MASS-SPECTROMETER



AMS facility (model 4110Bo-AMS) is a 1 MV Tandetron, multi-element machine designed to be able to detect not only low-mass isotopes such as  $^{10}\text{Be}$ ,  $^{14}\text{C}$  and  $^{26}\text{Al}$ , but also heavy elements such as  $^{129}\text{I}$ . This type spectrometer was used to analyze the Shroud of Turin.

## SPECTRAL ANALYSIS LABORATORY

### **Analytical methods:**

- Atomic absorption spectrometry with electrothermal atomization in graphite furnace.
- Atomic absorption spectrometry in flame.
- Atomic emission spectrometry in flame.
- Molecular spectrometry
- Traditional wet chemical methods.



*Facility for atom absorption spectrometry KAC-120*



*Flame atomization spectrophotometer C 115 M1*



*Sample preparation*

**Adopted measuring techniques:**

- Determination of elemental composition of metallic zirconium by atomic absorption spectrometry with electrothermal atomization.
- Determination of elemental composition of ferrous metals by atomic absorption spectrometry with electrothermal atomization.
- Determination of elemental composition of non-ferrous and noble metals atomic by atomic absorption spectrometry with electrothermal atomization.
- Determination of elemental composition of biosamples by atomic absorption spectrometry with electrothermal atomization.
- Determination of elemental composition of nonmetals by atomic absorption spectrometry.

**SPECIAL GRID-CLUSTER FOR COMPUTER MODELING OF RADIATION DAMAGES IN REACTOR MATERIALS**



The IAP Cluster is a beowulf cluster comprising 11 computational and one master node. There are 88 processor cores, wide variety of software and compilers that support MPI and OpenMP standards available for users. For cluster load control a queuing system Torque is used.

**INNOVATION PRODUCTS OF IAP NAS OF UKRAINE,  
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE**

**SET-UP FOR PRODUCTION OF SURFACE COATINGS  
BY ATOMIC AND ION SPUTTERING OF MATERIALS**

Experimental equipment for the application of protective coatings on the blades of last sections of steam turbines in thermal and nuclear power plants has been developed. A technology of erosion- and corrosion-resistant coating deposition on the steam turbine blades by atomic and ion materials sputtering is designed. The method of electron-beam evaporation technique with the ionization of vapor by high-frequency electromagnetic field and with the introduction of additional gaseous carrier of an “amorphizer” chemical element into the plasma has been developed.

**The main advantages:**

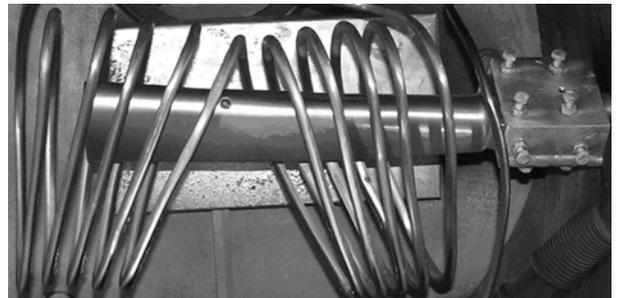
- Highly erosion and corrosion-resistant protective coating;
- Increased reliability and efficiency of blades of the steam turbines last sections;
- Resource of the rotor blades increased by 25 - 30%;
- There is no need of expensive turbines reconstruction by stelit soldering at the incoming blades.

**Specifications:**

- Cathode ray gun:
  - range of electron beam current - 1 ... 1000 mA;
  - accelerating voltage - 60.0 kV.
- Generator for HF vapor phase ionization and heating of the sample:
  - frequency - 440 kHz;
  - power - 10 kW.
- Automatic control of the electron-beam set-up and the process of evaporation.



*Set-up for production of surface coatings*



*Turbine blade in a vacuum chamber of a facility*

**SOURCE WITH THE VOLUME PLASMA GENERATION  
OF NEGATIVE IONS (CESIUM-FREE SOURCE)**

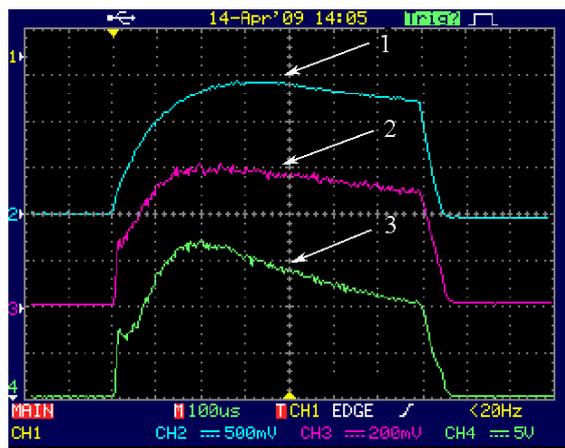
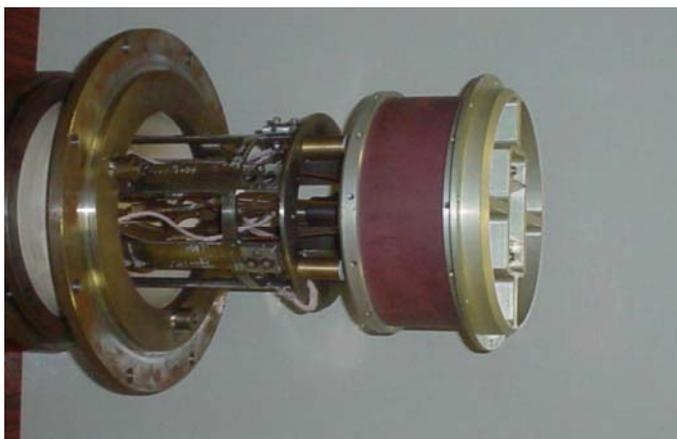
A cesium-free negative hydrogen ions source based on tubular discharge with plasma injection from inverted gas magnetron..

**The main advantages**

- Increased concentration of negative ions near the emission aperture due to the flow of negative ions to the emission aperture from plasma volume, and their additional generation in this area.
- The highest value of emission current density of ions H<sup>-</sup> ( $j = 600\text{mA/cm}^2$ ) among the sources of volume generation of H<sup>-</sup> ions. The beam current value reaches 60 mA.
- The developed source can also operate in mode of generation of intense proton beams.

## Field of application

Can be used as injectors in high energy accelerators, powerful neutron generators, meson factories, in ADS technology, in accelerators for neutron therapy.



## HELICON ION SOURCE

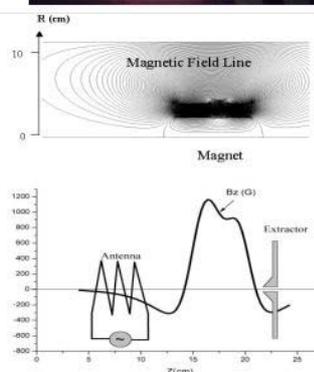
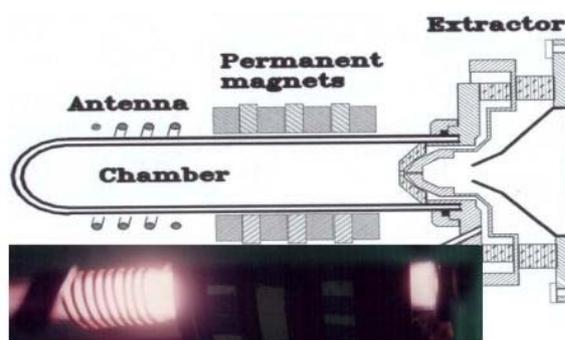
Compact plasma generators with magnetic systems on permanent magnets have been developed..

### The main advantages

The developed ion sources, in comparison with the existing ones, consume ten times less power under the same parameters of the ion current. The very high brightness of the beam (argon, helium, hydrogen) at the level of 300 A/m<sup>2</sup> rad<sup>2</sup> eV is achieved. The developed plasma ion sources are characterized by plasma concentrations of  $n \sim 10^{13}$  cm<sup>-3</sup> at low RF power consumption  $P < 300$  W, and working gas pressure 10 mTorr. Increased plasma density in the source is reached due to the creation of effective RF discharge with an external magnetic field.

### Areas of Application

The use in plasma technology, ion sources for nano- and micro-analytical analyzers, mass spectrometers with inductively coupled plasma.



## NUCLEAR SCANNING MICROPROBE (NSMP)

In NSMP is used the focused beam of light ions (hydrogen and helium ions) with energies of some MeVs for nondestructive microanalysis of bulk samples with the resolution of 0.1 – 1.0 μm and sensitivity of about 1 ppm, which enables two-dimensional mapping of elements distribution in the surface layers at the depth of about 10 microns. Also, NSMP can be used in proton beam lithography for creating three-dimensional nanostructures in resistive materials.

### The main advantages

The IAP, NAS of Ukraine, is first among the CIS to develop and put into operation NSMP, with the parameters similar to that of the best world analogues in the class of Van de Graaff type electrostatic accelerators.

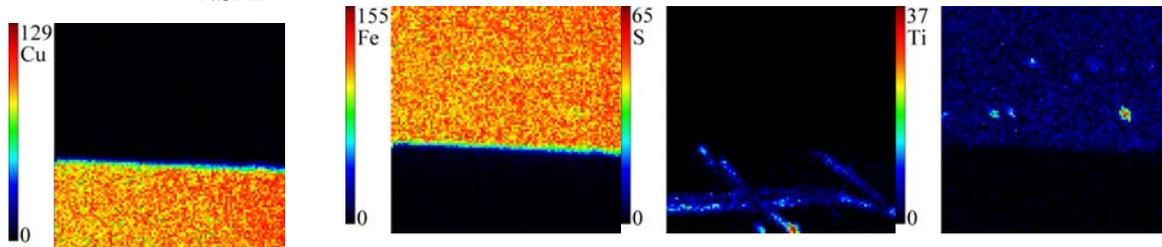
## Field of application

The industry areas where control for the distribution of impurities in materials subject to operational loads is essential, for studying the biological objects at the cellular and subcellular level, for fabricating micro- and nano-structures in photonics, bio-medical applications, etc.



*A new type of active ion-optical element, an integrated doublet or quadrupole lenses*

NSMP



*Mapping of chemical elements distribution in zone of joint of solid-phase bounding of heterogeneous materials (stainless steel -copper). Zone dimensions  $100 \times 100 \mu\text{m}^2$*

## NOVEL COMPOSITE NANOSTRUCTURED BIOMATERIALS

The methods have been developed and optimized for creating nanostructured materials based on chitosan-apatite composites for medical use. Comprehensive studies of structural and biophysical characteristics of the synthesized biomaterials have experimentally proved their broad functional suitability for orthopedics, dentistry, and general medicine.

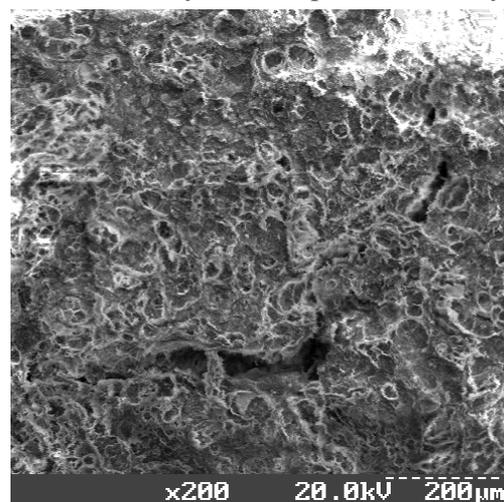
### The main advantages

Chitosan-apatite composite materials are highly biocompatible; control and changing the synthesis conditions and subsequent processing allow achieving the necessary product operational characteristics.

In Ukraine, "Tutoplast" is one of the most common materials for osteoplasty nowadays produced by SPE "Bioimplant", Kyiv. Among the disadvantages is a relatively high price and some biocompatible properties that do not fully satisfy the orthopedists.

### Areas of Application

Orthopedics, dentistry, and general medicine.



*Microstructure of porous ChAp*

## APPARATUS FOR NON-DESTRUCTIVE ANALYSIS OF HYDROGEN IN MATERIALS

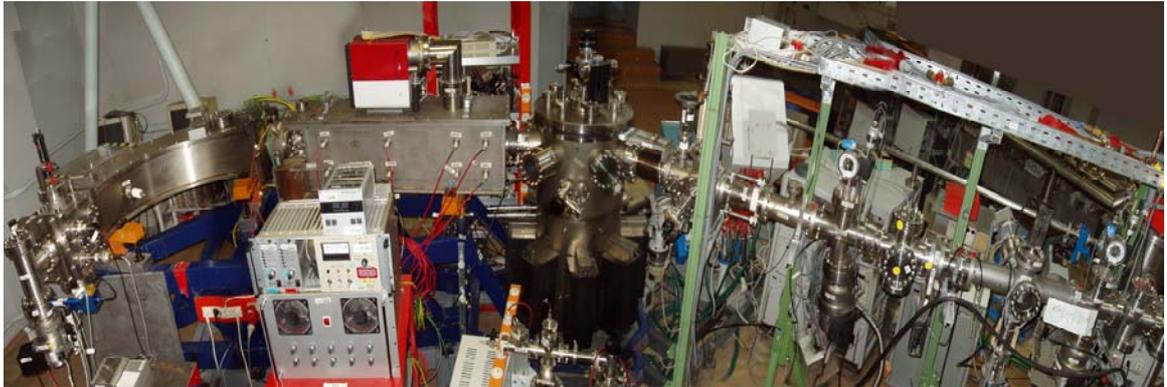
It is a high resolution elastic scattering channel, a part of the analytical accelerating complex of IAP, NAS of Ukraine. It is intended for non-destructive quantitative determination of hydrogen and its depth distribution in the sample material by recoil nuclei method.

### The main advantages

The vacuum in the scattering chamber is  $10^{-7}$  Pa, that makes contamination of samples impossible during the experiment. The limit of detection of hydrogen is about 10 ppm. It allows the exploration of the hydrogen content in metals, where it is present in trace amounts. The relative energy spread is  $1.5 \times 10^{-3}$ , which is an order of magnitude higher than when using standard silicon surface-barrier detector.

### Field of application

The channel can be used for non-destructive determination of the hydrogen concentration in structural materials, working at high and low temperatures, as well as under intense flows of ionizing radiation.



## MONOCHROMATIC X-RAY SOURCE ON THE BASIS OF ELECTROSTATIC PROTON ACCELERATOR

It is a channel of monochromatic X-rays generated by accelerated protons, a part of the analytical accelerator complex of IAP, NAS of Ukraine.

### The main advantages

The combination of high-current low-energy proton beam with the radiation generation chamber allowed obtaining very intense source of monochromatic X-rays with low background and high monochromaticity.

### Areas of Application

Determination of elements in the surface layers of structural materials and biomaterials by XRF and  $\mu$ XRF methods, study of the radiation influence on individual cells.



## NATURALLY ENRICHED LEAD-208 FOR NUCLEAR POWER

Lead isotopes are distributed in nature as (in %): 208 - 52.4%, 206 - 24.1% 207 - 22.1% 204 - 1.4%. Lead 208, 207 and 206 are of radiogenic origin. Therefore, in nature there may be cases of anomalous isotopic enrichment within the crystal lattice of the very old age minerals that contain long existing living radioactive isotopes.

The method of forecasting, research, and extraction of mineral carriers of lead enriched in Pb-208 is proposed. Analysis of geological and mineralogical data and their experimental verification show that within the Ukrainian Shield and placer deposits formed by its denudation there are deposits of minerals containing lead-208 in an amount to 0.7% by weight of mineral with isotopic content of Pb-208 to 88% (deposits) and 95% (native ore).

### The main advantages

Leads of the above isotopic composition have much better nuclear-physical properties (lower neutron capture cross sections) than the lead of conventional isotopic composition, and are promising material for the liquid-metal carrier in nuclear reactors.

The presence of naturally enriched material allows to predict the low cost production of lead with this isotopic composition out of natural isotope-enriched mineral sources: up to 30 usd/kg (88% - purity in placers) and up to 60 usd/kg (95% - purity of indigenous manifestation). The cost of such artificially enriched isotope compositions according to Oak Ridge laboratory is ~ 1000 and ~ 2000 usd/kg, respectively.

### Areas of Application

Geology; materials for liquid-metal carriers in nuclear reactors.



## KIT "MECHANICS" FOR LABORATORY WORKS ON PHYSICS IN SECONDARY SCHOOLS

The kit allows all of the laboratory works to be performed in studying mechanics at the school physics course according to the current curriculum of the Ministry of Education of Ukraine. The kit is executed as a case with a lid, with elements and devices placed at lodgments; the case can transform and serve as a tripod, inclined plane etc.

### The main advantages

The introduction of the arc- protractor with the installation and locking holes and corners markings, as well as the connection of lid with the case using detachable, for example, fork joints and ball retainers can significantly spare time of the laboratory work, when it is necessary to set the inclined plane or race-track or change their angle of inclination. Together all the features of the kit allow a teacher to free extra time to explain new material and reinforce the knowledge and skills of pupils.

### Areas of Application

The "Mechanics" kit is the technical means for training; it can be used at secondary and vocational schools in the labs classrooms for studying mechanics.

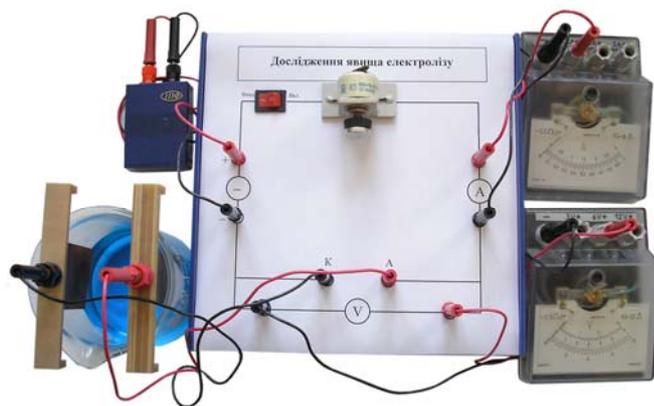


## KIT "ELECTRICITY" FOR LABORATORY WORKS ON PHYSICS IN SECONDARY SCHOOLS

The "Electricity" kit is intended for laboratory work and physical practicum, under the current curriculum of the Ministry of Education of Ukraine, it includes a switching panel, modules of electron radioelements, an ammeter and a voltmeter DC, a set of electrical circuits patterns, a rheochord, a magnetic needle, an electrolysis set, and a power supply. The kit provides for all of the laboratory works of the school physics course according to the current curriculum of the Ministry of Education of Ukraine.

### The main advantages

The "Electricity" kit, apart from instruments and accessories, includes a set of guidelines for laboratory work and physical work practicum. The set is provided with complete instructions for laboratory works on electricity under the curriculum of the Ministry of Education of Ukraine. All works are clearly structured and comprise: aim, equipment table, theoretical information, instructions for work performance, test questions. Theoretical data briefly describe of the physical phenomena and processes studied at the work. Therefore, prior classwork and textbook studying is essential for thorough study of the material.



### Areas of Application

General educational institutions of Ukraine.

## UNIVERSAL SOFTWARE AND HARDWARE COMPLEX FOR COMPUTERIZATION OF SCIENTIFIC AND EDUCATIONAL EXPERIMENTS

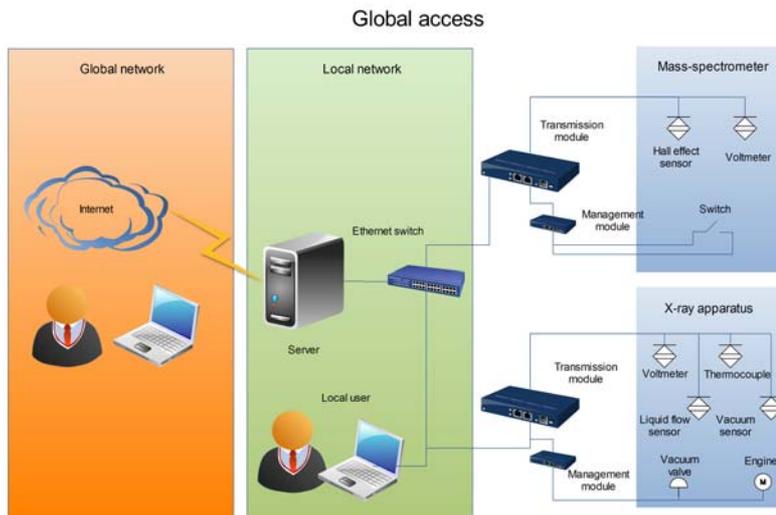
Universal hardware and software complex (UHSC) consists of a set of analog sensors, a device for recording and data transfer, a control device, and computer software (SW). The device for data registration and processing is implemented as a separate module, and interaction with any computer device for processing, analysis and visualization of experimental data is built on wide-spread open Ethernet technology, which enables both individual and collective work with UHSC.

### The main advantages

Modular approach allows quickly adapt the UHSC to the existing equipment and to develop new computerized research and teaching apparatus. The use of common data transfer standards will enables building interactive devices and systems with users' remote access. Also, UHSC may be useful in training using expensive equipment, providing the possibility of collective use, where information and control of the experiment can be done online.

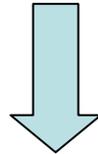
### Areas of Application

UHSC is a flexible tool for the computerization of scientific and educational experiments, it can be used in educational institutions and research organizations.



**TRAINING OF SCIENTIFIC PERSONNAL AT IAP NAS OF  
UKRAINE**

Training of Magisters by speciality of “Physics” at joint chair of experimental and theoretical physics of the Dept. of Physics and Mathematics at Makarenko Sumy Pedagogical University.

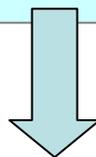


**IAP Postgraduate study:**

- 01.04.01 – physics of devices, elements and systems;
- 01.04.02 – theoretical physics;
- 01.04.16 – physics of particles, nuclei and high energies;
- 01.04.20 – physics of charged-particle beams;
- 03.00.02 – biophysics

**IAP Doctorate:**

- 01.04.01 – physics of devices, elements and systems;
- 01.04.02 – theoretical physics;
- 01.04.16 – physics of particles, nuclei and high energies.



**A specialized Board of Studies on theses defence works at the IAP:**

- 01.04.02 – theoretical physics;
- 01.04.20 – physics of charged-particle beams.;

## INTERNATIONAL COOPERATION

The Institute of Applied Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine (IAP NAS of Ukraine) is working in close cooperation with CERN (Geneve, Switzerland) under the International Project on the design and construction of an electron-positron collider (CLIC=Compact Linear Collider) for energies of about 3 TeV and electric field gradients approaching 100 MeV/m. IAP NAS of Ukraine researchers have found a mechanism underlying RF breakdown and plasma formation in the accelerating structures, which is a serious obstacle blocking the advancement of the Project.



The examination of the experimental spectra from the plasma formed in the DC sparc CLIC revealed the presence of hydrogen lines of appreciable intensity, permitting the plasma density, composition, and ion temperature to be estimated. Using nuclear analysis techniques with the ERDA end station of the IAP NAS of Ukraine accelerator-based analytical facility, a relative hydrogen content was measured in ultrapure copper from which the accelerating structures are made. The results obtained are vital for further investigations into the breakdown and plasma formation mechanisms, and thus, for finding ways to avoid these effects.

IAP NAS of Ukraine takes active part in theoretical studies of the antiproton beam cooling down in the storage ring in the framework of the FAIR Project (FAIR=Facility for Antiproton and Ion Research). The objective of the Project is to perform experiments in nuclear – and elementary particle physics, viz, studies of the quark-gluon plasma, antiproton program, applied studies to verify quantum electrodynamics in strong electromagnetic fields, etc.



IAP NAS of Ukraine workers attend conferences and meetings held in the countries

participating in the Project.

IAP NAS of Ukraine also maintains cooperation with IAEA (Austria) under the Projects “Using nuclear techniques for the characterization and preservation of cultural heritage artifacts in European region” and “Application of microanalytical techniques to environment monitoring and materials science”.



With a view to saving research time and combining research efforts in the field of surface-layer modification, application of nuclear techniques to the characterization of the surface layer structure and composition, construction of advanced equipment for use in nanotechnology research, IAP NASU signed a Protocol of Scientific cooperation with the Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Russia). про виконання спільних науково-дослідницьких робіт.

In 2011, IAP NAS of Ukraine made an Agreement with the Institute of Physics, (Augsburg, Germany) about collaborative research including exchange of scientific information on the problems of experimental and theoretical physics of mutual interest (e.g. anomalous diffusion in condensed media) preparation of joint publications, performing computations for both Institutes, as well as training young researchers on a full – and part-time basis.

In last years the Institute of applied physics NAS of Ukraine has collaboration with Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences on the common project named: “Ultrastructural organization, crystal-chemical characteristics and morphological transformation of nanostructured calcium phosphate in pathological deposits from human cardiovascular system”. This project aimed at studying the crystal-chemical, ultrastructural and morphological characteristics of calcium phosphate pathological deposits from human cardiovascular system and adequate model samples, to facilitate research on methods of preventing and slowing ectopic biomineralization.

In 2011, a Memorandum was made between IAP NAS of Ukraine and the Science and Technology Center of Ukraine (STCU) about technology transfer. In the same year, IAP NASU and STCU made a Bilateral Agreement under Project P464 “Investigation of representative samples of uranium ores from Ukraine deposits”.

Also in 2011, a general agreement was reached between IAP NAS of Ukraine and the Institute of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences (Chernogolovka, Russia) about a long-term scientific cooperation in basic and applied research in chemical physics as stipulated by Act No 130/192 of 14.06.2011 passed by the Russian and the Ukrainian Academy of Sciences.

ABSTRACTS OF WORKS

ПОГЛОЩЕНИЕ МОЩНОСТИ В ПЛАЗМЕННОМ ИОННОМ ИСТОЧНИКЕ ГЕЛИКОННОГО ТИПА

С. Н. Мордик, В. И. Мирошниченко, О. В. Алексенко, В. Е. Сторишко — Институт прикладной физики НАН Украины;

К. Н. Степанов, В. В. Ольшанский — НИЦ ХФТИ НАН Украины

Отправлена в журнал “Ядерна фізика та енергетика”.

Абстракт — В статье решается задача поглощения мощности в плазменном ионном источнике геликонного типа. Для расчетов выбран источник ионов, который сейчас используется в качестве инжектора аналитического ускорительного комплекса (АУК) на основе ускорителя Ван-де-Граафа. Результаты получены для водородной и гелиевой плазмы. Для различных плотностей плазмы найдены значения внешнего однородного магнитного поля, при которых поглощение мощности максимально..

1. Введение

Ионные источники, которые используются в качестве инжекторов ускорителей Ван-де-Граафа, должны работать в экономичных режимах (с минимальным уровнем вводимой в плазму мощности). Работа в режиме потребления большой мощности не представляется возможной из – за конструктивных особенностей ускорителя Ван-де-Граафа.

Геликонные источники ионов могут обеспечивать высокую плотность плазмы, а следовательно и высокую плотность тока при малой вводимой мощности (для Ван – де - Граафа менее 350 Вт). Экспериментальное определение оптимальных режимов работы источника ионов во всем диапазоне значений внешнего магнитного поля – достаточно трудоемкая задача. Поэтому в данном случае целесообразно использовать возможности численного моделирования [1-3].

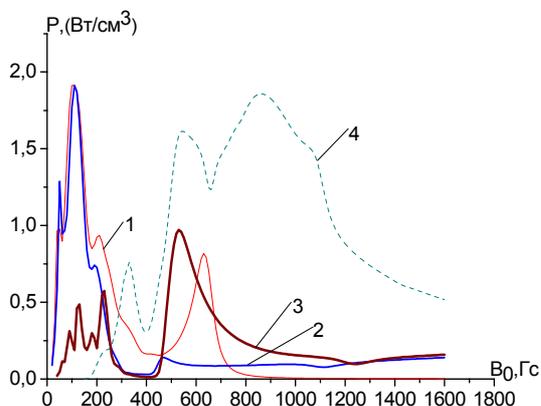


Рис. 1. Для водородной плазмы: 1-  $n_0 = 1 \cdot 10^{10}$ ; 2-  $n_0 = 1 \cdot 10^{11}$ ; 3-  $n_0 = 1 \cdot 10^{12}$ ; 4-  $n_0 = 1 \cdot 10^{13}$

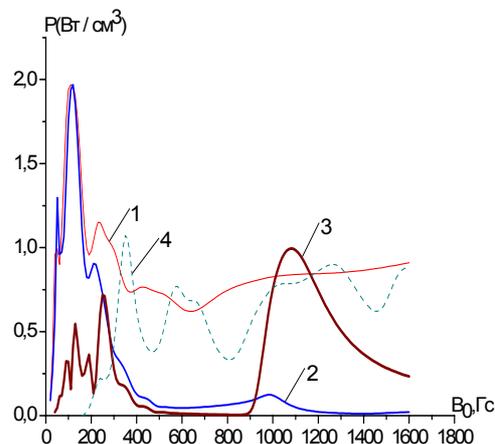


Рис. 2. Для гелиевой плазмы: 1-  $n_0 = 1 \cdot 10^{10}$ ; 2-  $n_0 = 1 \cdot 10^{11}$ ; 3-  $n_0 = 1 \cdot 10^{12}$ ; 4-  $n_0 = 1 \cdot 10^{13}$

2. Расчет поглощения мощности

Расчет поглощения мощности проводился для двух сортов плазмы: на основе водорода, гелия. Результаты приведены на рис. 1,2.

Заключение

Имеется два диапазона величин магнитного поля, при которых поглощаемая мощность максимальна.

Для водорода: 100 – 200 Гс; 600 – 800 Гс.

Для гелия: 100 – 200 Гс; 1000 – 1200 Гс.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Исследование нелинейных процессов формирования прецизионных ионных пучков в ВЧ-источниках с высокой плотностью плазмы и зондовых системах с неравномерным распределением частиц в фазовом пространстве”.

Список литературы

- Mordyk S.M., Voznyy V.I., Miroshnichenko V.I., Storizhko V.E., Sulkio-Cleff B., Shulga D.P. Hydrogen/helium ion injector for accelerator – based microprobe facilities // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. - В 231, 2006 – p. 37 – 42.
- Shamrai K.P., Taranov V.B. Volume and surface rf power absorption in a helicon plasma source // Plasma Sources Sci. Technol – 1996 (5) p. 474 - 491
- Shamrai K.P., Virko V.F., Kirichenko G.S. Geometrical resonances of helicon waves in an axially bounded plasma // Plasma Sources Sci. Technol. – 2002 (11) p. 10–26

## КАТАСТРОФИЧЕСКОЕ ОКИСЛЕНИЕ СПЛАВА НА ОСНОВЕ ЦИРКОНИЯ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИОНАМИ АРГОНА

А.П. Кобзев — Объединенный институт ядерных исследований;  
В.А.Батурин, А.Ю.Карпенко, С.М.Дуванов — Институт прикладной физики НАН  
Украины

Статус работы (Направлена для печати в редакционно-издательский отдел ОИЯИ как препринт ОИЯИ)

**Абстракт** — В работе представлены экспериментальные результаты по наблюдению катастрофического окисления приповерхностного слоя сплава на основе циркония, облученного ионами аргона. При расчетном проективном пробеге ( $R_p$ ) ионов аргона (150 кэВ) в 0,07 микрон в Zr толщина окисленного слоя найдена равной около 0,7 микрон. Измеренная стехиометрия покрытия, а также его окраска не противоречат выводу об образовании оксида  $ZrO_2$ . Обсуждается возможный механизм окисления. Результаты работы могут быть использованы в области создания новых материалов для аэрокосмической, радиационной техники, медицины и во многих других высокотехнологичных областях.

### Экспериментальные условия, результаты работы и их обсуждение

Образцы сплава циркония диаметром около 20 мм и толщиной 3 мм вырезались из монокристаллических зерен и полировались до зеркального блеска. Облучение образцов масс-сепарированными ионами  $Ar^+$  было выполнено со следующими параметрами: энергия 150 кэВ; флюенс  $\approx 1 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ ; плотность ионного тока  $\approx 4 \text{ мкА/см}^2$ ; температура подложки  $\leq 150^\circ\text{C}$ ; остаточный вакуум  $3 \times 10^{-4} \text{ Па}$ . Стехиометрия и распределение концентрации элементов по глубине были измерены методами RBS и ResBS ионов  $^4\text{He}^+$  с энергиями вблизи известного кислородного резонанса (рассеяние  $^{16}\text{O}(^4\text{He}, ^4\text{He})^{16}\text{O}$  при 3,045 МэВ). Проективные пробеги ионов  $Ar^+$  в Zr оценивались расчетами с использованием программы SRIM2008. Окраска покрытия оценивалась визуально.

На рис.1 представлена серия спектров обратного рассеяния ионов гелия от тонкой оксидной пленки, образовавшейся на поверхности образца сплава Zr после облучения ионами аргона. В районе 800 канала четко видна «ступенька» в парциальном выходе ОР ионов гелия от Zr, ширина этой ступеньки совпадает с шириной сигнала от O в районе 300 канала. Пики от кислорода при резонансных энергиях свидетельствуют об образовании оксидного слоя. Более того, окраска сформировавшейся пленки имеет характерный для фианита ( $ZrO_2$ ) синевато-фиолетовый оттенок. Расчет по программе SRIM2008 показал, что

толщина пленки на порядок превышает величину проективного пробега ионов аргона в цирконии, что свидетельствует о протекании катастрофического (или линейного, или «горячего») окисления поверхности циркониевого сплава.

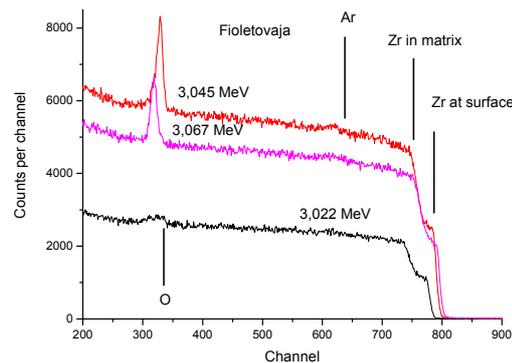


Рис. 1

Для выяснения точного механизма формирования оксидной пленки требуются дополнительные эксперименты с использованием остаточной атмосферы из газа изотопа  $^{18}\text{O}_2$  и определения энергий активации [см. например,1] процесса при повышенных температурах облучения. **Выводы**

В работе обнаружено формирование протяженного оксидного слоя на поверхности сплава на основе Zr, толщина которого на порядок превышает  $R_p$  ионов  $Ar^+$  в Zr. Окраска, измеренный стехиометрический состав оксидного слоя не противоречат выводу о формировании пленки из фианита ( $ZrO_2$ ). Скорость роста и толщина покрытия свидетельствуют о протекании быстрого окисления. Требуются дополнительные эксперименты для прояснения точного механизма процесса.

Работа частично поддержана в рамках двухсторонних украино-немецких проектов МОН Украины («Изучение свойств современных наноструктурированных систем методами ядерного микроанализа с высокой разрешающей способностью») и IB BMBF at DLR UKR05/003 (2006-9) и UKR10/064 (2011-13).

### Список литературы

1. S.M.Duванov, A.G.Balogh. Two-stage diffusion and nanoparticle formation in heavily implanted polycrystalline  $Al_2O_3$  // Nucl. Instr. and Meth. B, 2000, T. B171, Is.4, p. 475-480.

# ONE-STAGE PROBE-FORMING SYSTEMS WITH QUADRUPOLE LENSES EXCITED BY INDIVIDUAL POWER SUPPLIES

K.I. Melnik, A.G. Ponomarev — Institute of Applied Physics NAS of Ukraine;  
A.A. Ponomarova, G.S. Vorobjov — Sumy State University

Published in Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, vol. 269, No. 20, 2011, pp. 2202-2205.

**Abstract** — The work deals with the ion optical characteristics of the probe forming systems (PFS) based on the quadruplet of magnetic quadrupole lenses with four power supplies. Excitation of the lenses of a final doublet of such system is determined from the stigmatic focusing conditions, and excitations of the first two lenses (downstream the beam) are free parameters which form parametric set of PFS. Based on this set a figure of merit as system acceptance reduced to the envelope dimensions in the target plane is determined for the optimization task. Solution of this task gives optimal excitations of the first two lenses allowing to increase demagnifications and acceptance of PFS with individual power supplies in comparison with separated Russian quadruplet.

## 1. Task definition

In quadrupole one-stage probe forming systems (PFS) of a nuclear microprobe it is necessary to use no less than two quadrupole lenses to create a stigmatic beam focusing on a target. While this, minimum two separated power supplies with the two last lenses downstream the beam (final doublet) connected to them are needed. If the number of quadrupole lenses in PFS  $N > 2$  then, as a rule, the remaining  $N-2$  lenses do not have separated power supplies and are coupled to one of the final doublet lenses. Such combination limits their capabilities to influence on a beam. The only one possibility to extend capabilities of such PFS is to separate these  $N-2$  quadrupoles along the optical axis and to find their optimal positions. The principal schema and main parameters varied during optimization process shown at Fig.1.

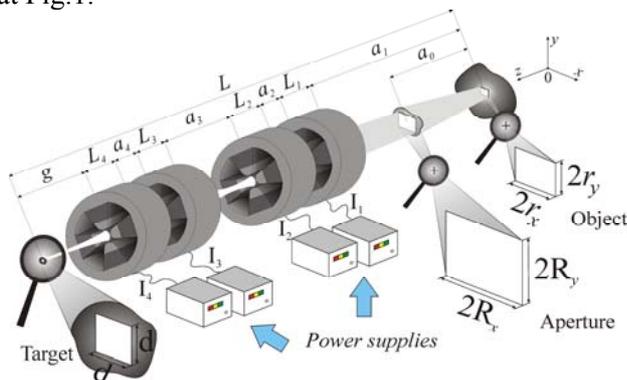


Fig. 1

The aim of the work is to improve Sumy nuclear microprobe with separated Russian quadruplet (Sumy SRQ) using two additional power supplies of the lenses.

## 2. Results

Optimization task of the probe forming process in the quadruplet of magnetic quadrupole lenses with individual power supplies was solved in the work. The problem is based on the usage of criterion of the maximal acceptance reduced to the envelope dimensions in the target plane. Obtained results show that quadruplets with independent power supplies (QIPS) has a number of advantages in comparison with separated Russian quadruplet. Concentrating action is  $Dx \times Dy \approx 5 \cdot 10^3$  in QIPS comparing to  $Dx \times Dy \approx 6 \cdot 10^2$  for Sumy SRQ. Value of reduced acceptance is  $A_{1.0}^* = 1.8 \mu m^2 mrad^2$  for QIPS and  $A_{1.0}^* = 0.67 \mu m^2 mrad^2$  for Sumy SRQ. Therefore, ion current density in QIPS should three times exceed current density in the existing Sumy SRQ.

Table 1 shows parameters of current system and QIPS-01 HD system with high demagnifications and providing maximal concentrating action  $Dx \times Dy \approx 4 \cdot 10^4$ , as one of the prospect variant of the Sumy microprobe improvement. Such system can be used in the modes with small beam current and high resolution.

Table 1

PFS	Sumy SRQ	QIPS-01 HD
Pole tip fields, T B1; B2 B3; B4	0.1897; -0.2039 0.2039; -0.1897	-0.42; -0.2352 0.1957; -0.1745
Demagnification s $Dx \times Dy$	23.5 × 23.5	-232.3 × 165.7
Acceptance, $\mu m^2 mrad^2$ , $A_{1.0}^*$	0.67	0.021
Collimator dimensions, $\mu m$ $2r_x \times 2r_y$ $2R_x \times 2R_y$	13.1 × 13.1 91.1 × 268.4	6.62 × 28.64 7.38 × 92.52

Performed within state budget subject “The nonlinear processes investigation of precision ion beams formation in RF high-density sources and microprobes with no uniform distribution of particles in phase space”.

## DIAGNOSTICS OF FIELD STRUCTURE OF MAGNETIC MULTIPOLE LENSES TO BE FINELY ADJUSTED IN ION- OPTICAL SYSTEMS

S.V. Kolinko, A.G. Ponomarev, V.A. Rebrov — The Institute of Applied Physics, National  
Academy of Science, Ukraine, Sumy

**Proceedings of The 3-rd International Conference Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy (NPAE-Kyiv2010), Kyiv2011.**

**Abstract** — A facility for field structure analysis of magnetic multipole lenses has been developed. Along with the multipole field structure detection in a pole gap it enables spatial position of the lens optical axis to be determined. A technique of field reconstruction based upon radial component of the magnetic induction measured by a Hall-probe in individual points at cylindrical surface in the pole gap is implemented in the facility. Calculation of field structure in the volume limited by the surface is based on Neumann problem for Laplace equation with measured data used as boundary conditions. The determination accuracy of lens optical axis is less than 5 mkm with probe rotation radius of 3 mm. An accuracy of induction measuring error is  $10^{-3}$ .

### MQL field reconstruction technique

MQL field reconstruction technique is described. MQL field is defined by magnetic scalar potential in the cylindrical coordinate system related to its optical axis as

$$w(r, \theta, z) = W_2(z) \cdot r^2 \sin(2\theta) + U_3(z) \cdot r^3 \cos(3\theta) + W_3(z) \cdot r^3 \sin(3\theta) + U_4(z) \cdot r^4 \cos(4\theta) + W_4(z) \cdot r^4 \sin(4\theta), \quad (1)$$

where  $W_2(z)$  – longitudinal distribution of main quadrupole component,  $W_3(z), U_3(z); W_4(z), U_4(z)$  – longitudinal distribution of main and rotational sextupole and octupole parasitic field components, correspondingly.

### Facility

General scheme and photo of the facility for MQL field research are presented and described.

### Experimental data

Series of experiments have been performed to define the position of MQL (OM-50 type of Oxford microbeam) optical axis and integrated lens doublet constructed in the IAP. The results of position determination for OM-50 optical axis in series of six measurements in constant coordinate Z are presented. Spread in values is not higher than 1 micron that shows stable repeatability of result. The Fig. 1 shows the position of optical axes of the integrated doublet of MQL in direct (X, Y) and inverse (X', Y') excitation. It is evident that resulting from residual magnetization the axes shift is about 20 microns.

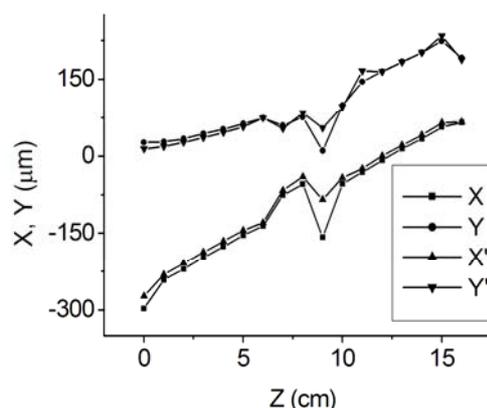


Fig. 1. Shift of optical axes of the MQL doublet in excitation polarity change.

### Conclusions

Experiment data show that the facility for field structure analysis of multipole lenses enables spatial position of the lens optical axis accurate within 5 microns to be determined. It provides a way for adjustment of two or several single lenses on a base optical axis. Since for a set of several MQL there is a technique of their optical axis alignment with a beamline axis, adjustment of the whole system becomes feasible.

Performed within state budget subject “The nonlinear processes investigation of precision ion beams formation in RF high-density sources and microprobes with no uniform distribution of particles in phase space”.

### Reference

1. Lebed S., Ponomarev A. Field reconstruction technique for testing magnetic quadrupole lenses // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. – 1997. – B 130. – P. 90–96.
2. Колинько С. В., Пономарев А. Г. Моделирование параметров установки для исследования структуры магнитного поля устройств ионной оптики // Вестник Сумского государственного университета. – 2008. №1. с. 144.
3. Колинько С. В., Пономарев А. Г., Мельник К. И. Установка для исследования структуры поля магнитных квадрупольных линз // ПТЭ – 2010. №1. с. 180.

## ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ КВАДРУПОЛЬНОЙ ЛИНЗЫ С КОНИЧЕСКОЙ АПЕРТУРОЙ

С.В. Колинко, А.Г. Пономарев, Д.В. Магилин — Институт прикладной физики  
НАН Украины

Тезисы докладов IX конференции по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям 21 – 21 февраля 2011 г. Харьков, 2011.

**Абстракт** — Рассмотрена магнитная квадрупольная линза, в которой радиус апертуры в продольном направлении изменяется по линейному закону. С использованием таких линз за счет уменьшения рабочего расстояния квадрупольных зондоформирующих систем можно достичь увеличения пространственного разрешения ядерных микронзондов.

С использованием магнитной квадрупольной линзы с регулируемым положением полюсных наконечников [1] изготовлен экспериментальный образец линзы с конической апертурой. Проведено исследование структуры поля этой линзы с помощью установки диагностики структуры поля магнитных квадрупольных линз [2].

Проведен расчет распределения градиента поля вдоль оптической оси в 3D геометрии для изготовленной линзы с конической апертурой. Поле рассчитывалось с использованием коммерческого численного кода OPERA-3D [3] (лицензия №VF5496).

На основании проведенных расчетов поля в 3D геометрии показано, что распределение градиента поля на оси таких линз может быть представлено аналитической зависимостью. Кривая распределения градиента поля  $W_2(z)$  на оси магнитной квадрупольной линзы, полученная экспериментально, совпадает с расчетной на уровне погрешности измерения установки. 1.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы № 364-07 “Исследование нелинейных процессов формирования прецизионных ионных пучков в ВЧ-источниках с высокой плотностью плазмы зондовых системах с неравномерным распределением частиц в фазовом пространстве”.

### Ссылки

1. Brazhnik V., Khomenko V., Lebed S., Ponomarev A. Some possibilities of nuclear microprobe focusing system improvement // Nucl. Instr. and Meth. B (1995), V.104, P.69-76.
2. Колинко С.В., Пономарев А.Г., Мельник К.И. Установка для исследования структуры поля магнитных квадрупольных линз // ПТЭ - 2010. №1. с. 180.
3. <http://www.vectorfield.co.uk>

# ONE-STAGE PROBE-FORMING SYSTEMS WITH QUADRUPOLE LENSES EXCITED BY INDIVIDUAL POWER SUPPLIES

K.I. Melnik, A.G. Ponomarev — Institute of Applied Physics NAS of Ukraine;  
A.A. Ponomarova, G.S. Vorobjov — Sumy State University

Published in *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 269, No. 20, 2011, pp. 2202-2205.

**Abstract** — The work deals with the ion optical characteristics of the probe forming systems (PFS) based on the quadruplet of magnetic quadrupole lenses with four power supplies. Excitation of the lenses of a final doublet of such system is determined from the stigmatic focusing conditions, and excitations of the first two lenses (downstream the beam) are free parameters which form parametric set of PFS. Based on this set a figure of merit as system acceptance reduced to the envelope dimensions in the target plane is determined for the optimization task. Solution of this task gives optimal excitations of the first two lenses allowing to increase demagnifications and acceptance of PFS with individual power supplies in comparison with separated Russian quadruplet.

## 1. Task definition

In quadrupole one-stage probe forming systems (PFS) of a nuclear microprobe it is necessary to use no less than two quadrupole lenses to create a stigmatic beam focusing on a target. While this, microprobe with separated Russian quadruplet (Sumy SRQ) using two additional power supplies of the lenses.

## 2. Results

Optimization task of the probe forming process in the quadruplet of magnetic quadrupole lenses with individual power supplies was solved in the work. The problem is based on the usage of criterion of the maximal acceptance reduced to the envelope dimensions in the target plane. Obtained results show that quadruplets with independent power supplies (QIPS) has a number of advantages in comparison with separated Russian quadruplet. Concentrating action is  $D_x \times D_y \approx 5 \cdot 10^3$  in QIPS comparing to  $D_x \times D_y \approx 6 \cdot 10^2$  for Sumy SRQ. Value of reduced acceptance is  $A_{1,0}^* = 1.8 \mu\text{m}^2\text{mrad}^2$  for QIPS and  $A_{1,0}^* = 0.67 \mu\text{m}^2\text{mrad}^2$  for Sumy SRQ. Therefore, ion current density in QIPS should three times exceed current density in the existing Sumy SRQ.

Table 1 shows parameters of current system and QIPS-01 HD system with high demagnifications and providing maximal concentrating action  $D_x \times D_y \approx 4 \cdot 10^4$ , as one of the prospect variant of the

minimum two separated power supplies with the two last lenses downstream the beam (final doublet) connected to them are needed. If the number of quadrupole lenses in PFS  $N > 2$  then, as a rule, the remaining  $N-2$  lenses do not have separated power supplies and are coupled to one of the final doublet lenses. Such combination limits their capabilities to influence on a beam. The only one possibility to extend capabilities of such PFS is to separate these  $N-2$  quadrupoles along the optical axis and to find their optimal positions. The principal schema and main parameters varied during optimization process shown at Fig.1.

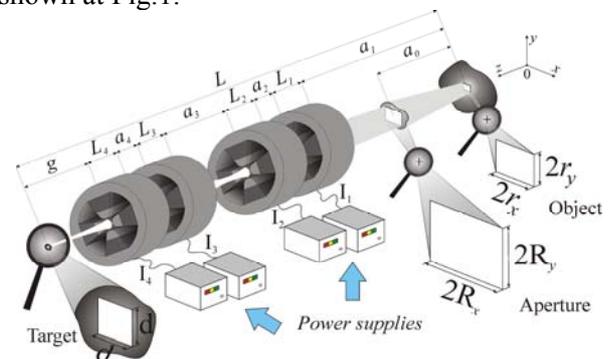


Fig. 1

The aim of the work is to improve Sumy nuclear

Sumy microprobe improvement. Such system can be used in the modes with small beam current and high resolution.

Table 1

PFS	Sumy SRQ	QIPS-01 HD
Pole tip fields, T B1; B2 B3; B4	0.1897; -0.2039 0.2039; -0.1897	-0.42; -0.2352 0.1957; -0.1745
Demagnifications $D_x \times D_y$	23.5 × 23.5	-232.3 × 165.7
Acceptance, $\mu\text{m}^2\text{mrad}^2$ , $A_{1,0}^*$	0.67	0.021
Collimator dimensions, $\mu\text{m}$ $2r_x \times 2r_y$ $2R_x \times 2R_y$	13.1 × 13.1 91.1 × 268.4	6.62 × 28.64 7.38 × 92.52

Performed within state budget subject “The nonlinear processes investigation of precision ion beams formation in RF high-density sources and microprobes with no uniform distribution of particles in phase space”.

## ИОННО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАДРУПОЛЬНЫХ ЛИНЗ С КОНИЧЕСКОЙ АПЕРТУРОЙ

А.Г. Пономарев, Д.В. Магилин, В.И. Мирошниченко - Институт прикладной физики НАНУ Украины,

А.А. Пономарева - Сумский Государственный Университет МОНМС

Статья опубликована в журнале «Прикладная физика», №3, 2011 г., с.-117.

**Абстракт** — Рассмотрены магнитная и электростатическая квадрупольные линзы, в которых радиус апертуры в продольном направлении изменяется по линейному закону. Проведен расчет распределения градиента поля вдоль оптической оси в 3D геометрии для длинных электростатической и магнитной квадрупольных линз. Получены аналитические зависимости для кардинальных элементов квадрупольных линз с конической апертурой. Проведено сравнение ионно-оптических свойств эквивалентных квадрупольных линз с конической и цилиндрической апертурами.

### 1. Поле квадрупольных линз с конической апертурой

Уравнение поверхностей гиперболической части для электростатической линзы задавалось уравнениями:

$$\begin{aligned} y &= \pm \sqrt{x^2 + r_0^2} + (z - z_i) \frac{R_0 - r_0}{L}, \\ x &= \pm \sqrt{y^2 + r_0^2} + (z - z_i) \frac{R_0 - r_0}{L}. \end{aligned} \quad (1)$$

Продольное сечение полюса в плоскости  $xOz$  при этом имеет вид рис. 1а. На рис. 1б показан внешний вид электродов линзы.

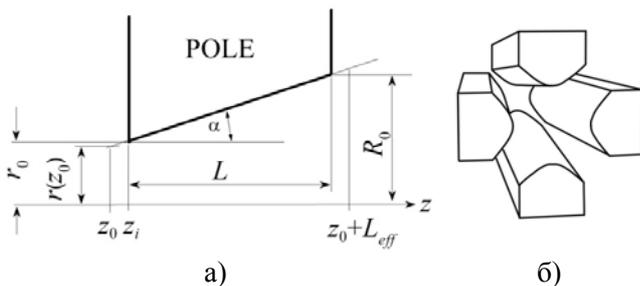


Рисунок 1.

Расчет поля в электростатической квадрупольной линзе с конической апертурой проводился с применением численного кода Laplas-3D. Поле в магнитной квадрупольной линзе рассчитывалось с использованием коммерческого численного кода OPERA-3D [1] (лицензия №VF5496).

Расчетное значение поля в средней части линзы (вдали от участков рассеянного поля)

оказалось близким к аналитической зависимости вида:

$$g_n(z) = \frac{G_n}{[1 + b(z - z_i)]^2}, \quad n = 1, 2,$$

где  $G_1 = \mu_0 \cdot 2 \cdot NI r_0^{-2} k$  – для магнитной квадрупольной линзы;  $G_2 = -V/r_0^2$ , для электростатической квадрупольной линзы;  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$  Гн – магнитная постоянная;  $NI$  – количество ампервитков в возбуждающей катушке полюса;  $r_0$  – радиус апертуры на входе в линзу (рис. 1а);  $k$  – коэффициент, учитывающий физические свойства материала полюсов и ярма магнитной квадрупольной линзы,  $V$  – потенциал полюса,  $b = (R_0 - r_0)/(L \cdot r_0) = \text{tg}(\alpha)/r_0$ .

Для определения свойств первого порядка aberrаций квадрупольных линз использовался метод изложенный в работе [2].

Показано, что свойства первого порядка зависят от угла конусности линз.

Анализ зависимости aberrаций линз показал, что хроматические aberrации уменьшаются с увеличением угла конусности. Однако сферические aberrации при больших положительных значениях конусности более чем в два раза меньше для линзы с конической апертурой, чем для эквивалентной линзы с цилиндрической апертурой. И наоборот для отрицательных значений конусности сферические aberrации линзы с конической апертурой превышают aberrации линзы с цилиндрической апертурой.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Исследование нелинейных процессов формирования прецизионных ионных пучков в ВЧ-источниках с высокой плотностью плазмы и зондовых системах с неравномерным распределением частиц в фазовом пространстве”.

### Список ссылок:

1. <http://www.vectorfield.co.uk>
2. Дымников А.Д., Осетинский Г.М. // Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1989, Т. 20, Вып. 3, С. 694.

# NONLINEAR PROCESSES OF PROBE FORMATION OF A BEAM WITH INHOMOGENEOUS PHASE DENSITY AT NUCLEAR MICROPROBE

A.G. Ponomarev, A.A. Ponomarov, V.I. Miroshnichenko — Institute of Applied Physics, NAS of Ukraine

Published in Nucl. Instr. and Meth. B, 269 (2011), 2197-2201

**Abstract** — The work describes nonlinear processes of probe formation on the target with allowance for an inhomogeneous density of ion distribution in phase space in the object collimator plane taken from experimental data. The chromatic aberrations, intrinsic aberrations of the 3rd order and parasitic aberrations caused by sextupole and octupole components of the magnetic quadrupole lens field have been taken into account in the object-target phase coordinate transformation. The criterion of obtaining the optimal resolution was defined as the minimum spot size (FWHM) for a fixed ratio  $I_{FWHM}/I_0$  of beam current in this spot to the total beam current.

## 1. Optimization of beam ion distribution at the target with inhomogeneous density in phase space

The work shows that the measurement of a total beam current and a beam spot size (FWHM) does not give full information about the current density in the spot, because a beam halo is ignored. Taking this into account an optimization of the parameters of the beam current distribution at the target was carried out to evaluate the resolution limit of NMP. The following input data was determined: initial density distribution in phase space, momentum spread and target-object transformation matrix of the particle's phase coordinates with allowance to all aberrations mentioned in abstract. For such input data the optimization task was formulated: to focus spot size of minimal area (FWHM) for a fixed ratio  $I_{FWHM}/I_0 = \text{const}$ . The sequence of operations in the defined optimization task is described.

## 2. Compatibility of the beam density distribution in phase space and the ion-optical characteristics of probe-forming systems

For beams from typical MeV electrostatic accelerators and probe-forming systems with small demagnifications a small filling of the available angular acceptance of the PFS results in a “non-occupancy” of the aperture collimator by particles. For matching the distribution parameters of the beam density in phase space with the ion-optical characteristics of such PFS a condenser system upstream of the object is used. Its action leads to an increase of the angular dispersion due to a decrease of the linear dispersion. As a result it is possible to

decrease the size of the object collimator and to fill the aperture collimator with particles saving the total value of the beam current and decreasing the spot.

## 3. Simulation

Simulation of the beam optics in PFS with inhomogeneous beam density distribution in phase space in the object plane was carried out to obtain the current density distribution at the target for different conditions of probe formation. These conditions are specified by the current value  $I_{FWHM}$  in the spot, the influence of parasitic sextupole and octupole components of the lens fields and by the axial brightness value. Two PFS with a short working distance were considered as one of the ways to improve the nuclear microprobe resolution: 1) based on the high excitation triplet (HET); 2) separated Russian quadruplet (SRQ). Result of the simulation is the beam current density distribution parameters at the target obtained for the different conditions of probe formation with inhomogeneous beam density distribution in phase space in the object plane. Current density distribution profiles at the target for SRQ are shown at Fig.1 as an example.

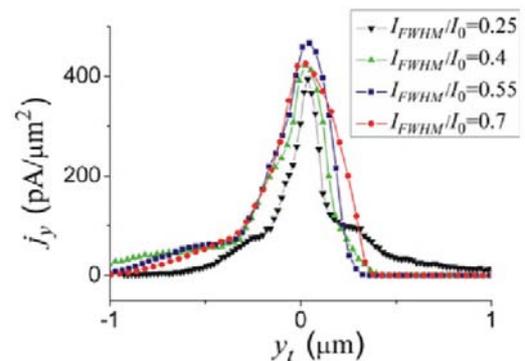


Fig.1

## 4. Conclusions

It was shown that parasitic multipole components result in a distortion of the beam distribution profile, an increase in spot size and a decrease of the maximal beam current density value.

The estimation of beam halo dimensions is needed for more precise measurements of nuclear microprobe resolution.

Performed within state budget subject “The nonlinear processes investigation of precision ion beams formation in RF height-density sources and microprobes with no uniform distribution of particles in phase space”.

## КОНДИЦИОНИРОВАНИЕ УСТАНОВОК ВЫСОКОГО НАПРЯЖЕНИЯ ПРИ ПОМОЩИ АЗОТНЫХ КОМПРЕССОРНЫХ СТАНЦИЙ

И.Г. Игнатъев — Институт прикладной физики НАН Украины;  
П.Е.Жарков, С.П. Оверчик — Концерн Укрросметалл, г. Сумы, Украина

Статья опубликована в журнале «Компрессорное и энергетическое машиностроение». №3 (25), с. 52 - 54, 2011.

**Абстракт** — Представлена методика кондиционирования установок высокого напряжения с использованием газообразного азота, получаемого непосредственно из воздуха. В качестве источника азота предлагается использовать азотную компрессорную станцию. На примере сверхвысоковольтного генератора на 2 МВ проведена оценка параметров элементов системы кондиционирования..

В работах [1,2] авторами данной статьи был предложен способ обеспечения газообразным азотом установок высокого напряжения (УВН) при помощи азотных компрессорных станций (АКС).

Одним из преимуществ данного способа, по сравнению с традиционным способом (при помощи баллонов), является упрощение и сокращение времени процесса подготовки установки к работе – кондиционирования.

В данной работе на примере электростатического генератора на 2 МВ описаны особенности кондиционирования УВН с использованием АКС. При этом учитывался многолетний опыт эксплуатации электростатического ускорителя «Сокол» ИПФ НАНУ с баллонной системой газоснабжения.

Одно из возможных новых направлений применения азотных компрессорных станций – подготовка к работе (кондиционирование) электрической изоляции установок высокого напряжения. Высокая эффективность кондиционирования достигается за счёт наличия практически неограниченного количества азота и не замкнутости процесса газообеспечения.

Данная технология требует осуществления непрерывного масс-спектрометрического контроля состава газа. К сожалению, в настоящее время отсутствуют аналитические методики определения состава газов, подвергающихся электрическим пробоям при сверхвысоком напряжении. Работы в этом направлении ведутся в настоящее время в ИПФ НАН Украины.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “ Исследование механизмов

атомных процессов при взаимодействии протонов МэВ-ных энергий с веществом ”.

### Список ссылок

1. И.Г. Игнатъев, П.Е.Жарков, С.П. Оверчик . Перспективы применения азотных компрессорных станций в технике высоких напряжений //Компрессорное и энергетическое машиностроение, 2010, №2 (20),– с. 11 - 13.

2. Патент на корисну модель № 57581 Україна, МПК Н 01 В 17/07, F04С 18/00 (2011.01). Спосіб газозабезпечення високовольтних структур установок високої напруги/ Жарков П.Є., Оверчик С.П., Ігнатъев І.Г./ заявник та власник Публічне акціонерне товариство «Науково-виробниче акціонерне товариство «ВНДІ КОМПРЕСОМАШ». – № 2010 07852; заявл. 23.06.2010; опубл. 10.03.2011, Бюл. №5 - 3 с.

## СПОСІБ ГАЗОЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ВИСОКОВОЛЬТНИХ СТРУКТУР УСТАНОВОК ВИСОКОЇ НАПРУГИ

П.Є. Жарков, С.П. Оверчик — Концерн «Укрросметал», г. Суми, Україна;  
І.Г. Ігнат'єв — Інститут прикладної фізики НАН України

Патент на корисну модель № 57581 Україна, МПК Н 01 В 17/07, F04C 18/00 (2011.01). - № 2010 07852; заявл. 23.06.2010; опубл. 10.03.2011, Бюл. №5 - 3 с.

1. Запропоновано спосіб забезпечення газоподібним азотом високовольтної структури установки високої напруги, який включає приготування електроізоляційної газової суміші і подачу газової суміші в робочу установку високої напруги, який відрізняється тим, що перед початком та в кінці роботи робочу установку і трубопроводи продувають сухим

азотом, відводять відпрацьований і подають чистий азот в установку високої напруги.

2. Запропоновано спосіб за п.1, який відрізняється тим, що сухий азот одержують безпосередньо на місці розташування установки високої напруги, причому джерелом одержання азоту є атмосферне повітря, яке очищують, стискають, осушують і розділяють на фракції.

Робота виконана в рамках держбюджетної наукової роботи “Дослідження механізмів атомних процесів при взаємодії протонів МеВ-них енергій з речовиною”..

## ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ АЗОТНЫХ КОМПРЕССОРНЫХ СТАНЦИЙ В ВИСОКОВОЛЬТНЫХ УСКОРИТЕЛЯХ

И.Г. Игнат'єв — Институт прикладной физики НАН Украины

Тезисы докладов IX Конференции по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям, (г. Харьков, 21.02 – 25.02 2011 г.), ХФТИ, с. 114, 2011.

В настоящее время в качестве газовой электрической изоляции большинства высоковольтных ускорителей (Ван де Графа, каскадных и других) используется сжатый азот. Газ поступает в бак ускорителя из системы баллонов высокого давления. В процессе эксплуатации качество изоляции ухудшается, требуется постоянная регенерация газа.

Предлагается альтернативный вариант газовой изоляции с использованием компактных азотных компрессорных станций (АКС) [1,2].

В АКС применяются мембранные технологии, позволяющие получать азот из атмосферного воздуха в практически неограниченном количестве. Давление газа может достигать десятков МПа при содержании азота до 99,99 %.

На примере высоковольтного ускорителя на напряжении 2 МВ показаны преимущества газового хозяйства с использованием АКС по сравнению с традиционной системой: экономичность, надёжность, простота в эксплуатации.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Исследование механизмов атомных процессов при взаимодействии протонов МэВ-ных энергий с веществом”.

### Список ссылок

1. И. Г. Игнат'єв, П.Е. Жарков, С.П. Оверчик. Перспективы применения азотных компрессорных станций в технике высоких напряжений// Компрессорное и энергетическое машиностроение. – 2010. – № 2(20). – с. 11 – 13.

2. Г.В. Кирик. Компрессорная техника концерна "Укрросметалл" в многоотраслевом хозяйстве Украины //Компрессорное и энергетическое машиностроение, 2009, № 3(17), с. 15 – 21.

## СПОСІБ ЗАХИСТУ ІНКУБАЦІЙНИХ ЯЄЦЬ КУРЕЙ ПОКРИТТЯМ З ХІТОЗАНУ

Бордунова О.Г. – Сумський національний аграрний університет МінАПК України  
Астраханцева О.Г. – Сумський національний аграрний університет МінАПК України  
Байдевятова О.М. – Інститут птахівництва НААН України  
Чіванов В.Д. — Інститут прикладної фізики НАН України

Статус роботи (Патент на корисну модель №59917 (19)UA (11)59917 (13)U (51)МПК (2011.01) А01К 43/00 А01К 41/00 Опубл. 10.06.2011, бюл. №11, 2011 СНАУ.)

**Анотація** — Корисна модель відноситься до області сільського господарства, а саме промислового птахівництва і може бути використана у комплексі заходів із захисту інкубаційних яєць курей. В основу корисної моделі поставлена задача розробки способу захисту інкубаційних яєць щодо негативних чинників довкілля та патогенної мікрофлори у якому б передбачувалося утворення на поверхні яєць захисної газопроникної плівки завтовшки 0,5-5,0 мкм з екологічно безпечної нетоксичної речовини природного походження з вираженими біоцидними властивостями щодо патогенної мікрофлори.

**Об'єкт винаходу.** – Хітозанова плівка для захисту щодо негативних чинників довкілля та патогенної мікрофлори інкубаційних яєць курей.

**Галузь застосування.** – Винахід відноситься до промислового птахівництва та може бути використаним для проведення заходів з удосконалення технології інкубації яєць курей.

**Суть винаходу.** – Якісний та кількісний склад розчину для утворення на інкубаційних яйцях захисного покриття з хітозану (0,1-3,0% водний розчин, рН 3,6).

**Технічний результат.** - Використання хітозанової плівки для захисту щодо негативних чинників довкілля та патогенної мікрофлори інкубаційних яєць курей дозволяє підвищувати показник виводимості з одночасним зниженням кількості патогенної мікрофлори на поверхні яєць.

Поставлена задача вирішується за рахунок використання у якості базового компонента препарату для захисту інкубаційних яєць курей природного біополімеру хітозану – похідного надзвичайно розпоширеного у природі матеріалу покривів ракоподібних і комах. Хітозану притаманні біоцидна властивості щодо патогенної мікрофлори і він є нетоксичною, екологічно безпечною речовиною [1-3].

Пропонований склад розчину для утворення на інкубаційних яйцях захисного покриття містить такі компоненти, мас. %:

Хітозан (кислоторозчинний) (рН 1% водного розчину у 2% оцтовій кислоті 3,6. Сорбційна активність за іонами міді 80,3 мг/г)	0,1-3,0
Пом'якшувач води	0,1
Неорганічний барвник (червоний пігмент)	0,01
Мікроелементи (магній, кобальт, цинк, мідь)	0,1
Вода	до 100 мас.%

Наведений склад розчину для утворення на інкубаційних яйцях захисного щодо негативних чинників довкілля та патогенної мікрофлори покриття сприяє підвищенню показнику виводимості курчат і зниженню кількості патогенної мікрофлори на поверхні яєць, що попереджує поширення небезпечних інфекційних захворювань сільськогосподарської птиці.

### Список посилань

1. Properties of chitosan and its salt.- // In: Chemical Products in Agriculture and Environment.-/ Eds. E. H. Gorecki, Z. Dobrzanski. Czech-Pol Trade (Prague, Brussels, Stockholm) 2003.-3.- 74-80.

2. Cenzig Caner, Ozge Cansiz Chitosan coating minimises eggshell breakage and improves egg quality // Journal of the Science of Food and Agriculture. -2007.-Vol. 88, Issue 1.-P. 56 – 61.

3. Xian De li et al. Effect of combination of chitosan coating and irradiation on physicochemical and functional properties of chicken egg during room-temperature storage // Radiation Physics and Chemistry.-Vol. 78, Issues 7-8.- 2009.- P. 589-591.

## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО МАГНЕТИТА РАЗЛИЧНЫХ ВАРИАНТОВ СИНТЕЗА ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ И ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

С.Н. Данильченко, В.Н. Кузнецов, А.С. Станиславов, О.В. Калинкевич, А.Н.

Калинкевич, Л.Ф. Суходуб — Институт прикладной физики НАН Украины;

М.Г. Демыденко, К.В. Тищенко — Сумський державний університет МОН України

**Статус работы:** Выйшла в журналі Journal of Nano- and Electronic Physics, Sumy State University 2011. – Т.3, №3. – С. 139-147.

**Абстракт** — Методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с электронной дифракцией и рентгенодифракционного анализа изучены структурные особенности наноразмерного магнетита  $Fe_3O_4$ , синтезированного с участием полимерных матриц (полисахарид хитозан и др.). На основании полученных комплексных данных выявлено выраженное влияние полисахаридной матрицы на ингибирование роста и стабилизацию размеров наночастичек магнетита. При этом направленное уменьшение размеров наночастиц  $Fe_3O_4$  сопровождается увеличением дефектности кристаллической решетки и уменьшением размеров элементарной ячейки. В работе показана эффективность взаимодополняющего использования ПЭМ с электронной дифракцией и рентгенодифракционных методов определения параметров структуры и субструктуры при исследованиях наноразмерных частиц магнетита, синтезированных в полисахаридной матрице.

### Результаты

Соосаждение магнетита в биополимерной матрице значительно уменьшает размеры образующихся наночастиц  $Fe_3O_4$ , что указывает на ингибирование хитозаном процессов образования и роста кристаллов  $Fe_3O_4$ . Структурные и субструктурные характеристики наночастиц  $Fe_3O_4$ , синтезированных в биополимерной матрице, чувствительны и к другим изменениям условий реакции, в частности, к добавлению щелочи, аммиака, изменению температуры соосаждения.

Результаты определения размеров кристаллитов методами рентгеновской дифракции удовлетворительно согласуются с прямыми измерениями наночастиц методом ПЭМ для частиц с размерами 5-20 нм. В случае больших кристаллических частиц (> 200 нм, образец «Магнетит 0»), размеры, измеренные с помощью ПЭМ, в 3-4 раза больше размеров кристаллитов определяемых по данным рентгеновской дифракции. Это объясняется тем, что каждая «большая» кристаллическая частица

состоит из нескольких кристаллитов или областей когерентного рассеивания.

Направленное уменьшение размеров наночастиц  $Fe_3O_4$  путем введения биополимерных ингибиторов роста, щелочи, аммиака, повышения температуры синтеза сопровождается увеличением дефектности кристаллической структуры наночастиц и уменьшением размеров их элементарной ячейки. Наиболее вероятно формирование железодефицитной структуры магнетита  $Fe_{3-\delta}O_4$  с нарушением исходного соотношения ионов  $Fe^{3+}$  и  $Fe^{2+}$ .

Детальное выяснение структурных особенностей наноразмерного магнетита, синтезируемого в биополимерных матрицах, требует дальнейших систематических исследований с использованием взаимодополняющих инструментальных подходов и с привлечением методов определения магнитных и электрофизических свойств, определяющих служебные характеристики данных материалов.

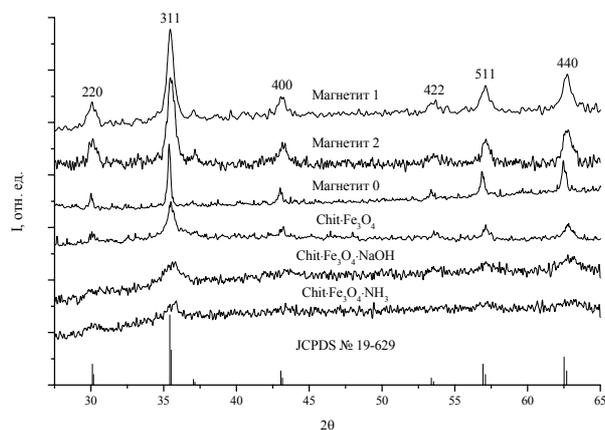


Рис. 1 Рентгеновские диффрактограммы образцов магнетита. Индексами отмечены основные линии  $Fe_3O_4$  (JCPDS № 19-629), внизу – теоретическая диффрактограмма  $Fe_3O_4$ .

## МІКРОЕЛЕМЕНТНИЙ СКЛАД ДОВГИХ ТА МІШАНИХ КІСТОК СКЕЛЕТА В НОРМІ

Гусак Є.В.<sup>1</sup>, Погорєлов М.В.<sup>2</sup>, Ткач Г.Ф.<sup>2</sup>, Данильченко С.М.<sup>1</sup>, Бумейстер В.І.<sup>2</sup>,  
Гордієнко О.В.<sup>2</sup>, Сікора В.З.<sup>2</sup>, Суходуб Л.Ф.<sup>1</sup>

Відділ маспектрометрії та біофізики ІПФ НАН України<sup>1</sup>; кафедра анатомії людини СумДУ<sup>2</sup>

**Статус роботи:** Вийшла в журналі Український морфологічний альманах 2010, Т 8, № 4, с. 51 – 55

**Абстракт** – стимуляція остеогенезу є однією з маловивчених і актуальних проблем травматології. Оскільки однією з основних функцій кісткової тканини є депонування макро- та мікроелементів, тому вивчення іонного складу кістяка важливе для пояснення процесів фізіологічного та репаративного остеогенезу. Ряд мікроелементів приймає участь у каталізі ферментативних реакцій, які протікають в остеогенних клітинах, і за їх відсутності чи дисбалансі порушується остеобластична і остеокластична диференціація, процеси утворення кристалів апатиту, міжклітинна взаємодія, що призводить до зрушень фізіологічного та репаративного ремоделювання кістки. Тому метою роботи було вивчення елементного складу великогомілкової, стегнової кісток та II поперекового хребця і проведення аналізу кореляційних співвідношень між ривними виявлених елементів.

**Матеріали та методи дослідження.** Отримані розчини кісткової тканини аналізували на спектрофотометрі С115-01 з полумєним та електротермічним атомізатором. Вибір методу атомізації ґрунтувався на концентрації елемента в розчині.

**Результати та їх обговорення.** У ході дослідження були отримані наступні діапазони загального вмісту відповідних біоелементів (табл.1).

**Таблиця 1.** Середній вміст мікроелементів у кістковій тканині шурів

Мікроелементи	Стегнова кістка	Гомілкова кістка	Поперекові хребці
Fe мкг/г	64,60±3,65	55,00±5,87	127,47±12,06
Mg мг/г	1,94±0,25	2,52±0,35	3,07±0,18
Zn мг/г	3,32±0,24	5,31±0,62	3,71±0,14
Cu мкг/г	2,36±0,31	2,53±0,26	4,23±0,47
Co мкг/г	1,41±0,09	1,52±0,22	2,44±0,29
Mn мкг/г	1,93±0,26	2,44±0,18	2,66±0,43
Ni мкг/г	2,38±0,56	4,00±0,87	4,95±0,96
Pb мкг/г	0,86±0,04	0,66±0,09	0,51±0,06
Cd мкг/г	0,024±0,00	0,025±0,00	-

	1	2	
--	---	---	--

Комплексна оцінка кількісного вмісту біоелементів показала, що найбільше у кістках цинку і магнію, це свідчить не тільки про їх біохімічну роль, але і механічну. Відповідно найменше у кістках Рb і Cd, що вказує на їх біохімічну роль у малих концентраціях.

Більшість есенційних елементів накопичується саме в поперекових хребцях, що свідчить про більшу активність ремоделювання та ферментів, що забезпечують даний процес. Токсичні елементи, такі як нікель та свинець, переважно накопичуються в довгих кістках, що також свідчить про меншу швидкість процесів ремоделювання в компактній речовині. Таким чином, елементний склад кістки має пряму залежність від будови кісткової тканини.

Отримані дані мікроелементного складу кісткової тканини у нормі доповнять загальні дослідження про хімічний склад кісток. Результати дослідження можуть бути використані як модельні для виявлення можливих патологічних порушень, у травматології — для виготовлення імплантатів з певними включеннями мікроелементів з метою оптимізації процесів остеорепації.

### Список посилань

Бельская Л.В. Оптимизация методики синтеза гидроксилатапата для биомедицинских целей / Л.В. Бельская, О.А. Голованова, А.П. Солоненко // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: фізика. — 2009. — Т. 22(61), №1. — С. 170 — 181

Москаленко Е.В. Остеоассоциированные химические элементы в организме больных ревматоидным артритом / Е.В. Москаленко // Збірник статей. — 2009. — Випуск 13, Т. 1. — С. 35-40

Новиков М.И. Динамика накопления микроэлементов в большеберцовых костях собак / М.И. Новиков, А.Н. Накоскин // Известия Челябинского научного центра — 2006. — Вып. 3(33). — С. 148 — 151

## ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУР СУЛЬФИДА ЦИНКА

Курбатов Д.И., Опанасюк А.С., Проценко И.Е. — Сумский государственный университет;

Софронов Д.С. – НТК “Институт монокристаллов” НАН Украины г. Харьков;  
Данильченко С.Н. — Институт прикладной физики НАН Украины

Статус работы: Вийшла в збірці доповідей 21st Int. Crimean Conference “Microwave & Telecommunication Technology”, Sevastopol-2011, Crimea, Ukraine

**Абстракт** — В работе описана технология получения и проведено исследование некоторых структурных свойств наноструктур ZnS осажденных методом вакуумной сублимации в квазизамкнутом объеме (CSVS). Изучение морфо-логии и структурных свойств полученных наноструктур проводилось методами высокоразрешающей сканирующей микроскопии и рентгеноструктурного анализа соответственно. Проведенные исследования позволили определить влияние режимов получения нанонитей на их основные структурные параметры (фаза, период решетки, размеры кристаллитов и т.п.).

### Результаты

В результате работы установлено, что при осаждении сульфида цинка методом CSVS на плоскость (220) ZnSe при температурах 240-350°C образуются нанонити толщиной 40-80 нм. Дальнейшие структурные исследования наноструктур ZnS показали, что период их кристаллической решетки изменялся в пределах 0,541-0,543 нм при размере кристаллитов  $L=10-15$  нм, что свидетельствуют об их дефектности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного агентства по вопросам науки, инноваций и информатизации Украины в рамках НИР "Использование новых материалов буферных и поглощающих слоев для дешевых пленочных поликристаллических СЭ на основе гетеропереходов".

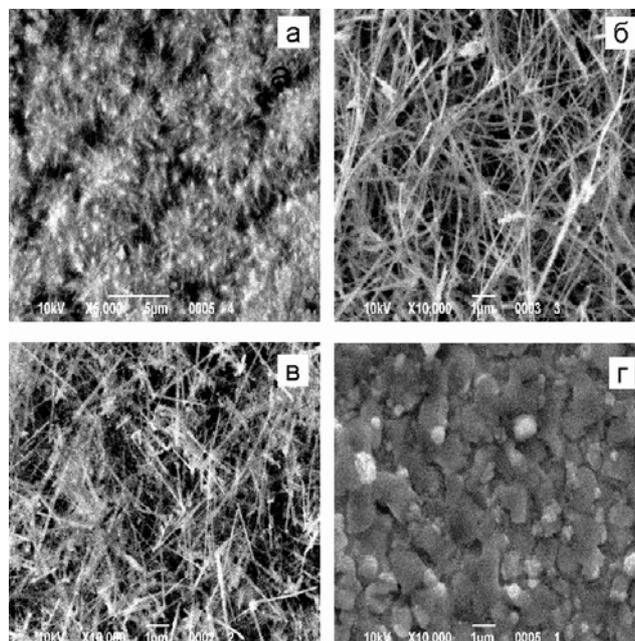


Рис. 1 Микроснимки поверхности наноструктур ZnS полученных при разных температурах подложки: 150°C (а); 240°C (б); 350°C (в); 550°C (г).

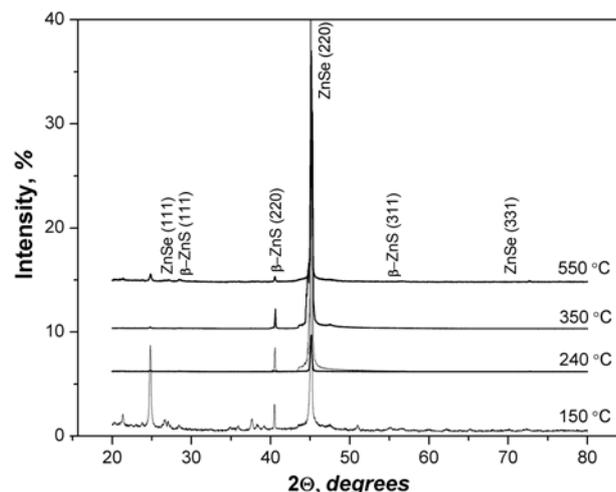


Рис. 2 Дифрактограммы от структур nano-ZnS/ZnSe, полученных при разных температурах подложки Ts.

**INVESTIGATION OF BONE REGENERATION BY  
PIXE-METHOD PP218-M**

**M.V. Pogorelov, V.V. Sikora, S.D. Bonchev - Anatomy Department, Sumy State University,  
Ministry Education and Science of Ukraine**

**I. Poddubniy – Dept. Biophysics@Mass Spectrometry, Institute for Applied Physics NAS  
Ukraine**

**Статус роботи (Bone 48 (2011) S161-S172;  
doi: 10.1016/j.Bone. 2011.03.378)**

**Абстракт** — AAS, ETAAS and ICP-AES are usually used for investigation of ion concentration in biological specimens. But this method can show how elements distribute along the object. The alternative method which can show distributions of all ions along the statements is PIXE (Proton Induced X-Ray Emission). Because PIXE is relatively easy to do, and because it can be done in non-invasive manner, the technique has been and is currently being applied to a wide range of material analysis problems.

Bone regeneration leads to change of mineral balance in injured human skeleton using instrumental analytical methods, such as atomization atomic absorption spectrometry (AAS). But there are few results about the distribution of bone minerals in the bone/bone regenerate interface.

In this study 16 laboratory rats 6 months old were used. Perforated defects, diameter 2 mm were made in sterile operating room with a stomatological borer in the middle third of the right tibia of the animals. The extracted bones with the defects (3, 10, 15 and 24 days after operation) were fixed in glutaraldehyde and embedded in epoxy resin. The specimen was analyzed by PIXE-method in Applied Physics Institute (Sumy, Ukraine). We studied the zone of generation and part of the non-injured bone just near the defect. The analyzed area was 1000x1000 $\mu$ m.

The present experiments that calcification starts from the middle part of the bone defect and spreads out to non-injured bone tissue later in the bone replacement process. Also we found that distribution of Cr, Cu and Mg correspond to the distribution of Ca and P. Cl, K, Ni, and Fe were found in all investigating areas and didn't correspond to main bone ions such as Ca and P.

## STRUCTURAL AND SUBSTRUCTURAL CHARACTERISTICS OF ZINC SELENIDE FILMS

M.M. Ivashchenko, A.S. Opanasyuk – Sumy State University;  
S.M. Danilchenko — Institute of Applied Physics of NAS of Ukraine

Статус роботи: Вийшла в журналі  
**Functional Materials V.18, #1, 2011**

**Abstract** — Structure and substructure characteristics of zinc selenide layers were investigated. The dependence of the orientation factor, lattice constant, coherent scattering domain size, microdeformation level from deposition temperature of films chalcogenide are established.

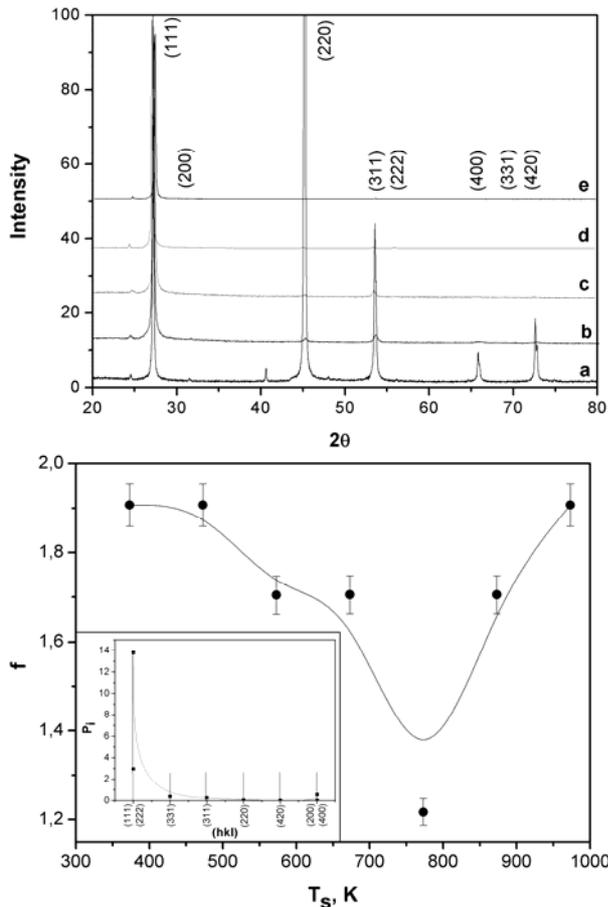


Fig. 1 Diffraction patterns of ZnSe films obtained at different substrate temperatures: a – charge; b – 373 K; c – 473 K; d – 673 K; e – 873 K (top) and dependence of orientation factor from substrate temperature (bottom).

On insertion resulted measuring of the pole density for film obtained at  $T_s=573$  K.

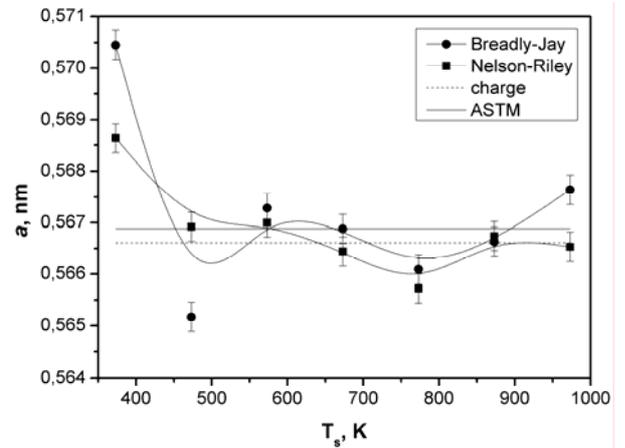


Fig. 2 Lattice constant versus condensation temperature dependence of ZnSe films.

### Conclusions

Was carried out a complex investigation of structural and substructural properties of the zinc selenide semiconductor films obtained by a CSVS method at the different substrate temperatures. It was estimated that the films were monophasic, have a stable zinc blend modification. Besides that in all cases well expressed texture [111] was observed. Was revealed a dependence of orientation factor, lattice constant, CSD size and microdeformation level from deposition temperature.

It was estimated that dependence of CSD size from condensation temperature has a view of curve with maximum, and the microdeformation level in most cases was decreased at the increasing of  $T_s$ . By the value of microdeformation  $\varepsilon$  and CSD size  $L$  was carried out an evaluation of the medium dislocation density in ZnSe films crystallines, which generate a boundaries and situated inside subgrains. It was established that films are characterized by the low concentration of dislocation density, which in general amass on the CSD boundaries. Polycrystalline ZnSe films with low dislocations concentration obtained by a CSVS method may be used as basis layers of devices with improved characteristics.

## STRUCTURAL AND OPTICAL CHARACTERISTICS OF ZNSE AND CDSE FILMS CONDENSED ON NON-ORIENTED SUBSTRATES

M.M. Ivashchenko, A.S. Opanasyuk – Sumy State University;  
S.M. Danilchenko — Institute of Applied Physics of NAS of Ukraine;  
V.V. Starikov – National Technical University “KhPI”, Kharkiv

**Статус роботи:** Вийшла в журналі *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2011. V. 14, N 2. P. 157-163.

**Abstract** — In this work the complex investigation of structural and optical properties of zinc and cadmium selenide semiconductor films deposited by close-spaced vacuum sublimation (CSVs) method using thermal evaporation on non-oriented substrates was carried out. The structural and phase analysis of the layers condensed at different substrate temperatures was performed. The transmission and reflection spectra of investigated films have been measured and their main optical characteristics have been calculated.

**Results** – It has been found that ZnSe films deposited by CSVs method possess a cubic structure, whereas CdSe layers are hexagonal. But in high-temperature condensates of zinc selenide and low-temperature cadmium selenide, by using XRD method it was fixed the tracks of a metastable phase that was hexagonal in ZnSe and cubic in CdSe. This phase is mainly located in the defect-containing fine-dispersed layer near the substrate.

For cubic ZnSe films in all the investigated range of condensation temperatures, the typical grown texture is [111]. In hexagonal CdSe layers deposited at  $T_s \leq 773$  K, an axial grown texture [002] was observed and, with increasing the substrate temperature, changed to the texture [102]. It was estimated that perfection of the film texture for zinc and cadmium selenide is worsened to some extent at intermediate condensation temperatures under condensation conditions close to thermodynamic equilibrium. It was discovered a complex dependence of crystallographic constants of materials on the condensation temperature, which can be caused by changes in their stoichiometry.

It was obtained spectral distributions of optical constants inherent to these materials. It was shown that  $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$  dependences of ZnSe films can be extrapolated by one line, while those of CdSe films had two linear parts. The lower values  $E_{g1} = 1.67 \dots 1.74$  eV correspond to the BG width of CdSe and higher  $E_{g2} = 1.87 \dots 2.25$  eV – to transitions of charge carriers excited by light between conduction band and segregated owing to spin-orbital interaction

low valence band of material (point  $\Gamma_7$ ). The BG width of ZnSe is  $E_{g1} = 2.59 \dots 2.67$  eV.

The conditions for obtaining single phase, high-textured stoichiometric chalcogenide films with good optical characteristics have been determined. These may be used in device structures, first of all in thin-film solar cells.

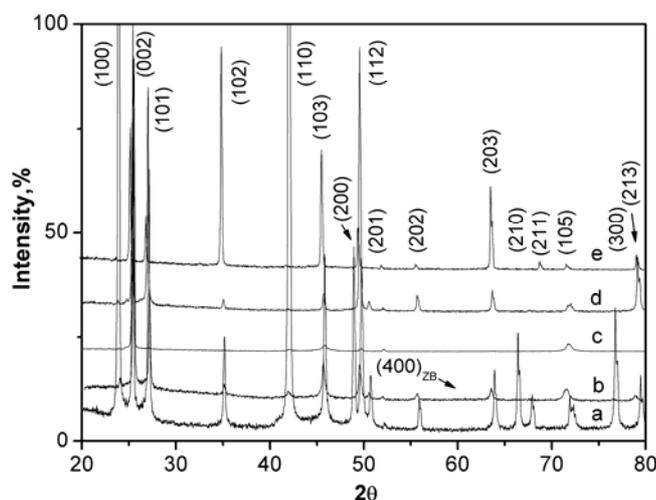


Fig. 1 X-ray diffraction of ZnSe (a) and CdSe (b) obtained at different substrate temperatures: charge (a); 373 K (b); 573 K (c); 773 K (d); 873 K (e).

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного агентства по вопросам науки, инноваций и информатизации Украины в рамках НИР "Использование новых материалов буферных и поглощающих слоев для дешевых пленочных поликристаллических СЭ на основе гетеропереходов".

# CHARACTERIZATION AND IN VIVO EVALUATION OF CHITOSAN-HYDROXYAPATITE BONE SCAFFOLDS MADE BY ONE STEP COPRECIPIATION METHOD

Sergei N. Danilchenko, Oksana V. Kalinkevich, Aleksei N. Kalinkevich, Tatyana G. Kalinichenko, Vyacheslav Y. Ilyashenko, Leonid F. Sukhodub — Institute for Applied Physics; Vadim V. Starikov – National Technical University “KhPI”, Kharkiv  
Anatoly M. Sklyar — Sumy State Pedagogical University, MES of Ukraine;  
Maksim V. Pogorelov, Valentina I. Bumeyster, Vitaly Z. Sikora — Sumy State University, MES of Ukraine

Статус роботи: Вийшла в журналі J Biomed Mater Res Part A: 96A: 639–647, 2011.

**Abstract** — Chitosan/hydroxyapatite scaffolds could be used for bone regeneration in case the application of auto- or allografts is impossible. The objective of the present work was to characterize and study *in vivo* biodegradation of simple chitosan/hydroxyapatite scaffolds. For this purpose, a series of chitosan/hydroxyapatite composites has been synthesized in aqueous medium from chitosan solution and soluble precursor salts by a one step coprecipitation method. A study of *in vivo* behavior of the materials was then performed using model linear rats. Cylindrical-shaped rods made of the chitosan/hydroxyapatite composite material were implanted into tibial bones of the rats. After 5, 10, 15, and 24 days of implantation, histological and histo-morphometric analyses of decalcified specimens were performed to evaluate the stages of biodegradation processes. Calcified specimens were examined by scanning electron microscopy with X-ray microanalysis to compare elemental composition and morphological characteristics of the implant and the bone during integration. Porous chitosan/hydroxyapatite scaffolds have shown osteoconductive properties and have been replaced in the *in vivo* experiments by newly formed bone tissue.

**Results** – A series of chitosan/hydroxyapatite composite materials has been synthesized in aqueous medium from chitosan solution and soluble precursor salts by a one step coprecipitation method. XRD patterns of the materials suggest the presence of nanocrystalline apatite with the average crystallite size of 20 nm. The similar size of crystallites is characteristic for natural bone bioapatite. The results of IR spectroscopy studies suggest the presence of carbonate ions in the synthesized materials. Thus, this relatively simple synthesis procedure allows obtain composite materials with nanocrystalline carbonate-substituted hydroxyapatite similar to natural bone bioapatite. There are several works demonstrating the ability of chitosan-hydroxyapatite scaffolds to support bone cell attachment and growth using isolated cell cultures. But the behavior of scaffolds of such type in organisms, their biodegradation and replacement by bone tissue *in*

*in vivo* is much less studied. The objective of the present study was to examine *in vivo* behavior of simple chitosan/hydroxyapatite scaffolds placed into a perforated tibial defect of model laboratory animals following the main stages of reparative regeneration. In these experiments porous chitosan/hydroxyapatite materials have shown good osteoconductive properties. Histomorphological studies have shown that the porous chitosan/hydroxyapatite materials undergo almost complete biodegradation. The complete replacement of porous chitosan/hydroxyapatite composite implant by newly formed bone tissue within bone defects in rats takes place on the 24th day of implantation. The results of this study suggest the high potential of simple chitosan/hydroxyapatite composite scaffolds produced by the one-step co-precipitation method as a filling material for orthopaedy and stomatology.

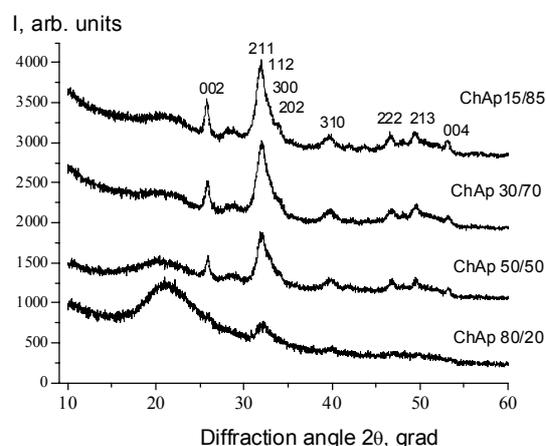


Fig. 1 X-ray diffraction patterns of ChAp samples with different initial component ratio; the lines marked with Miller indices belong to hydroxyapatite

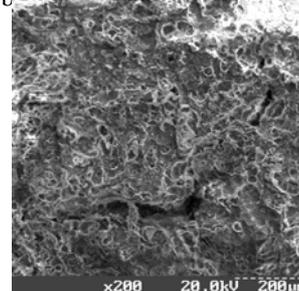


Fig. 2 Microstructure of the porous ChAp.

# SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF HYDROXYAPATITE-BASED COATINGS FOR MEDICAL IMPLANTS OBTAINED ON CHEMICALLY MODIFIED Ti6Al4V SUBSTRATES

A. Yanovska, V. Kuznetsov, A. Stanislavov, S. Danilchenko, L. Sukhodub  
Institute of Applied Physics National Academy of Sciences of Ukraine, Sumy, 40000 Ukraine

Вийшла в журналі *J. Surf. Coat. Technol.* 205 (2011) 5324-5329.

**Abstract** — In this study various schemes of chemical pretreatment with NaOH, HF, or H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> are used to form bioactive hydroxyapatite (HA) coatings by a thermal substrate method. Investigations were conducted to examine the properties of the coatings produced on untreated and chemically pretreated substrates as well as the bioactivity of HA coatings subjected to soaking with a simulated body fluid (SBF) for 7 days.

The thermal substrate method has proved suitable for a fast formation of uniform coatings on titanium and Ti6Al4V substrates at low temperatures, with the chemical composition and film thickness being controlled. The chemical pretreatment is intended to improve the bioactivity of the coatings, their uniformity and adhesion to the substrate.

## 1. Introduction

Hydroxyapatite is the most commonly used biomaterial in bone tissue engineering because of its superior biocompatibility [1]. It is a mineral component of bone tissue which contains nearly 60% of HA. Several methods are available for the application of HA coatings onto metal substrates.

The thermal substrate method is an alternative means to form coatings from aqueous solutions [2-4]. A vital phase of the experiment is the pretreatment and cleaning of the substrate surface with a view to improving the bioactivity and crystallization of HA. Several factors influence the HA nucleation and crystallization: pH value of the solution, ion concentration [5] the heating time and temperature, substrate surface roughness, etc [6].

## 2. Experimental

Ti6Al4V specimens, 36 x 1.9 x 0.36 mm in size, were used as substrates. They were polished with sandpaper, washed in acetone (15 min), 96% ethanol (15 min) and three times rinsed with distilled water under ultrasound.

The cleaned and polished titanium alloy plates were soaked with 200 ml of 35% NaOH aqueous solution, other in 200 ml of a 35% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> solution and keeping them at 60 °C for 2 h and then for 48 h at room. A third part was etched in HF.

## 3. Results and discussion

### 3.1. Calcium phosphate deposition after NaOH pretreatment

After NaOH-treatment of the Ti6Al4V substrate, due to surface passivation TiO<sub>2</sub> is formed. As shown The alkali treatment produces negatively charged Ti-O- groups interacting with positively charged Ca<sup>2+</sup> ions, which in turn attract phosphate ions from the precursor solution to form an initial calcium-phosphate layer. After deposition by the thermal substrate method, a relatively thick (1.04 mm) porous coating is formed on the substrate surface.

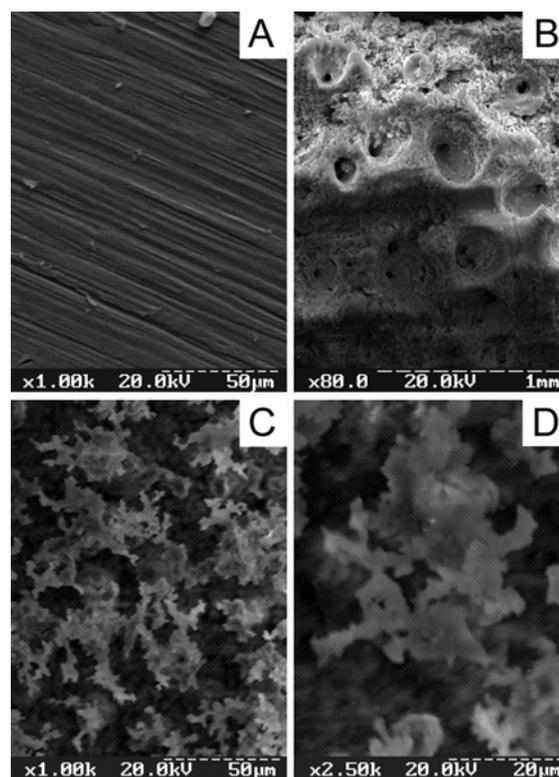


Fig.3. SEM micrographs showing the morphologies of (A) treated by NaOH surface and (B) HA coating after deposition from the aqueous precursor solution by thermal substrate method. (C, D) are a higher magnification of (B).

The surface morphology of the peroxide-treated Ti6Al4V substrate is shown in Fig.4 (A). The porous coating was obtained under the same conditions as before: substrate temperature 105°C, solution pH = 6.5, 2-hour treatment by the thermal substrate method (Fig. 4 (B)). The coating formed on the

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-treated surface corresponds to HA is illustrated in Fig. 6 (d). Fig. 4 shows a porous (C, D) and a smooth surface (E, F) of the HA coating in higher magnification.

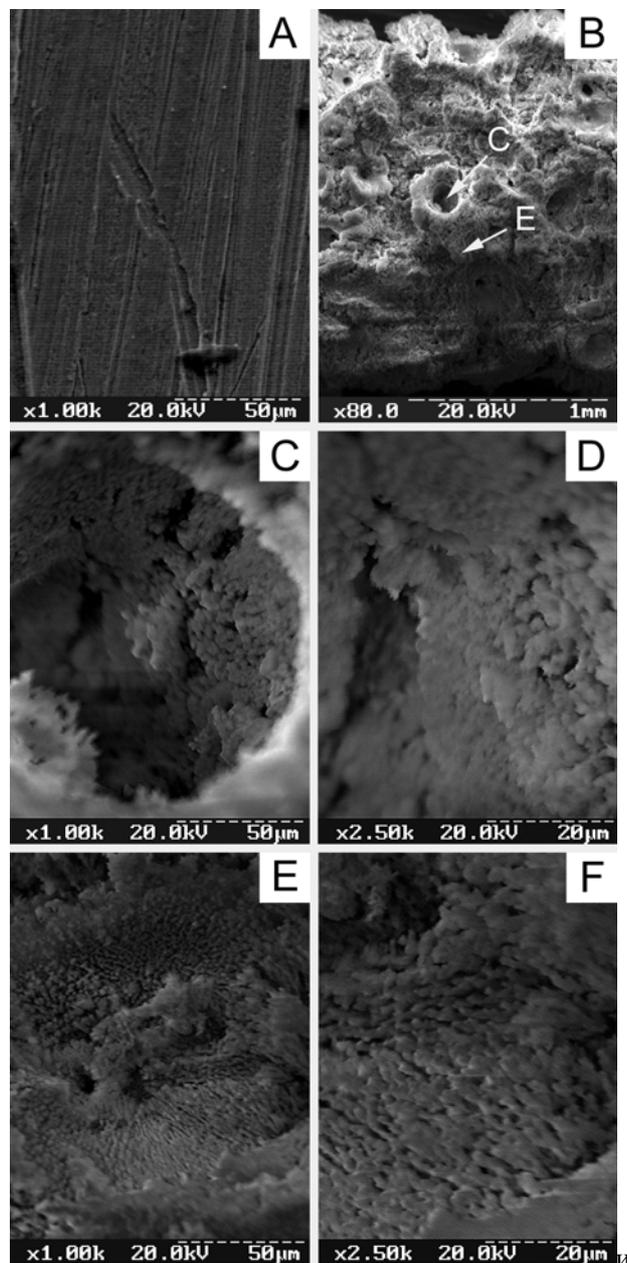


Fig.4. SEM images showing the morphologies of (A) H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-treated Ti6Al4V substrate; (B) H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-treated Ti6Al4V substrate after deposition of the HA coating by thermal substrate method; (C, D) higher magnification of (B) in a pore; (E, F) higher magnification of (B) on the surface of the coating.

### Conclusions

The objective of our work was to investigate the influence of the chemical pretreatment on the coating formation by the thermal substrate method. We can draw a conclusion that with chemical treatments performed prior to deposition, the coatings become more uniform and well-adhered.

Hydroxyapatite needle crystals are formed on the HF-treated Ti6Al4V substrate surface. Subjected to H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and NaOH pretreatment hydroxyapatite crystals are densely packed and the coatings are more amorphous as is seen from XRD diffraction patterns. The coatings after chemical pretreatment are expected to show better bonding ability owing to their pores and crystalline HA structure.

Робота виконана в рамках держбюджетної теми №383-11 "Вивчення молекулярних механізмів радіаційних пошкоджень в біоб'єктах наноструктурних розмірів з використанням біофізичних та ядернофізичних методів дослідження".

### Literature

1. W. Xue, X. Liu, X. Zheng, C. Ding., Mater. Res. 74A: (2005) 553–561.
2. Kuroda K., Ichino R., Okido M., Takai O., J. Biomed Mater Res. 59 (2) (2002) 390–397.
3. Kuroda K., Nakamoto S., Ichino R., Okido M., Pilliar R.M., Materials Transactions. 46 (7) (2005) 1633–1635.
4. Kuroda, K., Miyashita, Y., Ichino, R., Okido, M., Takai, O., Materials Transactions. 43 (12) (2002) 3015–3019.
5. Kuroda K., Ichino R., Okido M., Takai O., J. Biomed. Mat. Res. 61(3) (2002) 354–359.
6. Okido M., Kuroda K., Ichino R., Materials Science Forum. 426-432 (4) (2003) 3457–3462.

## ДИФФУЗИОННЫЙ РОСТ И МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДВУМЕРНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ НОВОЙ ФАЗЫ, РАСПОЛОЖЕННОГО НА МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЕ

А.В. Коропов – Институт прикладной физики НАН Украины

Статус работы (Опубликована в журнале «Журнал нано- и электронной физики», 2010, Т. 2, № 4, с. 31-46.)

**Абстракт** – Рассмотрен диффузионный рост двумерного выделения новой фазы, расположенного на межзеренной границе конечной толщины, с учетом диффузионных потоков атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе. Проанализирована устойчивость растущего выделения достаточно малого радиуса относительно произвольных малых возмущений его формы с учетом поверхностной кинетики атомов примеси на поверхности межзеренная граница-выделение. Найдены пороговые радиусы выделения, выше которых нарастает амплитуда искажения формы и амплитуда относительной деформации формы выделения.

Уравнение диффузии атомов примеси в межзеренной границе толщиной  $\delta$  вокруг выделения новой фазы запишем в виде

$$\frac{\partial n_B}{\partial t} = D_B \Delta n_B + \frac{2I_V}{\delta}. \quad (1)$$

Здесь  $n_B$  – объемная плотность атомов примеси в межзеренной границе,  $D_B$  – коэффициент межзеренной диффузии,  $I_V$  – диффузионный поток атомов примеси из объема зерна к межзеренной границе. Рассматриваем плоское цилиндрическое выделение новой фазы с постоянной высотой  $h > \delta$  и радиусом основания  $R = R(t)$ , расположенное на межзеренной границе (см. рис. 1).

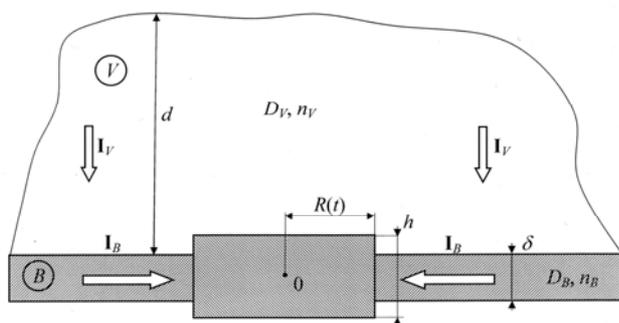


Рис. 1.

Уравнение (1) решается в квазистационарном приближении ( $\partial n_B / \partial t = 0$ ), граничные условия берутся в виде

$$D_B \frac{\partial n_B}{\partial r} \Big|_{r=R} = \beta_B [n_B(R) - n_{BR}]$$

$$n_B \Big|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{n}_B. \quad (2)$$

Здесь  $r$  – расстояние от центра выделения,  $n_{BR}$  – равновесное значение плотности атомов примеси в межзеренной границе при  $r = R$ ,  $\beta_B$  – поверхностный кинетический коэффициент.

В различных предельных случаях найдена скорость роста выделения  $dR/dt$  и время роста выделения от радиуса  $R_1$  до радиуса  $R_2$   $\Delta t(R_1, R_2)$ .

Проведен анализ устойчивости круговой формы выделения в процессе его роста (морфологической устойчивости) аналогично тому, как это было сделано для островков конденсированной фазы при осаждении вещества на поверхности кристалла [1-3].

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы «Полевые подходы к проблемам ядерной физики и энергетики на базе квантовой хромодинамики и исследования электродинамических процессов и структурных эффектов при взаимодействии пучков частиц с полями и веществом» (2007-2011 гг.).

### Список литературы

1. А.В. Коропов. Рост и устойчивость островка новой фазы при осаждении вещества на поверхности кристалла // Вісник СумДУ. Сер. Фізика, математика, механіка, 2006, № 9 (93), с. 49-62.
2. А.В. Коропов. Устойчивость формы островков малых размеров при осаждении вещества на поверхности кристалла // Харьковская нанотехнологическая Ассамблея – 2007. Т. 2 / Под общей ред. И.М. Неклюдова, В.М. Шулаева. Харьков: ННЦ «ХФТИ», ИПП «Контраст», 2007, с. 67-71.
3. А.В. Коропов. Морфологическая устойчивость островков малых размеров при осаждении вещества на поверхности кристалла // Физика твердого тела, 2008, Т. 50, № 11, с. 2093-2097.

## ДИФФУЗИОННЫЙ РОСТ И МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДВУМЕРНОЙ ПОЛОСТИ В МОНОСЛОЕ АДАТОМОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА

А.В. Коропов – Институт прикладной физики НАН Украины

**Статус работы (Вышла в журнале «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования», 2011, № 8, с. 79-85.)**

**Аннотация** – Рассмотрен диффузионный рост двумерной полости (поры) в монослое адсорбированных атомов (адатомов) на поверхности кристалла в случае вакансионного механизма диффузии в монослое. В том случае, когда радиус полости мал по сравнению с характерной диффузионной длиной вакансий, проанализирована устойчивость растущей полости относительно произвольных малых возмущений ее формы с учетом граничной кинетики вакансий на границе полости. Найдены пороговые радиусы полости, выше которых нарастает амплитуда искажения формы и амплитуда относительной деформации формы полости.

Уравнение диффузии «двумерных» вакансий в монослое адатомов вокруг пятна с учетом как испарения, так и конденсации атомов на поверхности кристалла запишем в виде

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n + \frac{N-n}{\tau} - \alpha I \frac{n}{N}. \quad (1)$$

Здесь  $n$  – двумерная плотность вакансий в монослое,  $D$  – коэффициент их диффузии,  $N$  – двумерная плотность адатомов в полностью заполненном монослое ( $N \gg n$ ),  $\tau$  – среднее время жизни адатомов до испарения с поверхности,  $I$  – внешний поток конденсации атомов на поверхности,  $\alpha$  – вероятность конденсации атома из потока  $I$  в свободной позиции. Аналогично работам [1-3] решается диффузионная задача вокруг полости слегка искаженной формы:

$$R(\varphi, t) = R(t) + \sum_{l \geq 1} \delta_l(t) \exp(il\varphi) \quad (2)$$

( $\varphi$  – полярный угол,  $\delta_l \ll R$ ) с граничными условиями на границе  $B$

$$D \frac{\partial n}{\partial r} \Big|_B = \beta \{ n - n_\infty \exp(\Gamma K) \}_B,$$

$$n|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{n}, \quad (3)$$

где  $\beta$  – граничный кинетический коэффициент,  $K$  – кривизна границы полости,  $n_\infty$ ,  $\Gamma$ ,  $\bar{n}$  – постоянные. Для возмущения вида  $\delta_l \exp(il\varphi)$ , где  $\delta_l \ll R$

$$K = \frac{1}{R} + (l^2 - 1) \frac{\delta_l}{R^2} \exp(il\varphi). \quad (4)$$

Для исследования вопроса об устойчивости формы (морфологической устойчивости) полости достаточно малого размера находятся и анализируются инкременты величин  $\delta_l$  и  $\delta_l/R$ :

$$\nu_l \equiv \frac{d}{dt} \ln \{ \delta_l(t) \} = \frac{\dot{\delta}_l}{\delta_l}, \quad (5)$$

$$\mu_l \equiv \frac{d}{dt} \ln \left\{ \frac{\delta_l(t)}{R(t)} \right\} = \frac{\dot{\delta}_l}{\delta_l} - \frac{\dot{R}}{R}. \quad (6)$$

Неустойчивость формы полости впервые наступает на второй гармонике; нарастание же относительной деформации формы полости  $\delta_l/R$  начинается при  $l=3$ . Находятся соответствующие пороговые радиусы полости.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы «Полевые подходы к проблемам ядерной физики и энергетики на базе квантовой хромодинамики и исследования электродинамических процессов и структурных эффектов при взаимодействии пучков частиц с полями и веществом» (2007-2011 гг.).

### Список литературы

1. А.В. Коропов. Рост и устойчивость островка новой фазы при осаждении вещества на поверхности кристалла // Вісник СумДУ. Сер. Фізика, математика, механіка, 2006, № 9 (93), с. 49-62.

2. А.В. Коропов. Устойчивость формы островков малых размеров при осаждении вещества на поверхности кристалла // Харьковская нанотехнологическая Ассамблея – 2007. Т. 2 / Под общей ред. И.М. Неклюдова, В.М. Шулаева. Харьков: ННЦ «ХФТИ», ИПП «Контраст», 2007, с. 67-71.

3. А.В. Коропов. Морфологическая устойчивость островков малых размеров при осаждении вещества на поверхности кристалла // Физика твердого тела, 2008, Т. 50, № 11, с. 2093-2097.

## ELECTRON-POSITRON PAIR PHOTO-PRODUCTION WITH RADIATION OF A PHOTON IN MAGNETIC FIELD AT NONRESONANT REGIME

**P.I. Fomin, R.I. Kholodov – Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine**

**Sent (10.2011) in journal Problems of Atomic Science and Technology.**

**Abstract** The electron-positron pair production by a photon in the case when one additional photon is emitted in external magnetic field under nonresonant condition has been investigated. The resonant conditions have the place, when the photon energy is close to the splitting between Landau levels. The differential probability of nonresonant process has been obtained and is three order of magnitude less the resonant case.

### Probability of the process

FAIR (Facility for antiproton and ion research project) is one of the largest research project today. It will be erected at GSI (Darmstadt) in the next few years. Quantum-electrodynamic test in strong electromagnetic fields, for example under heavy ions collisions, is one of the important applied task of this project.

The quantum-electrodynamic (QED) processes in the presence of strong magnetic field close to the critical value of about  $10^{13}$  Gs may accompany fast heavy nuclei collisions.

The process of  $e^+e^-$  production by a photon with photon radiation in resonant condition has been considered in previous work [1]. This work is devoted to the study of such the process at nonresonant regime.

Probability amplitude of the process is described by Feynman diagrams that are shown in Fig.1 according standard rules of QED [2].

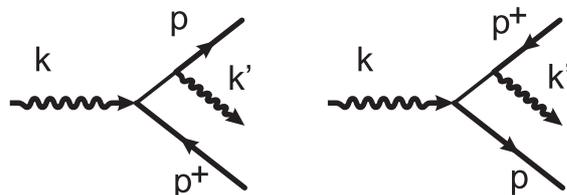


Fig. 1 Feynman diagrams of the process of  $e^+e^-$  pair production by a photon with photon emission

Wave lines in the diagrams correspond to wave functions of photons. External and internal solid lines are wave functions and Green's functions correspondingly of electrons (positrons) in a homogenous magnetic field.

The process is studied in the lowest Landau levels approximation (LLL or ultraquantum approximation).

Resonances in the process have the place at the poles of Green's function of electron, when intermediate state goes to mass shell. In magnetic field it gives the frequency of the final photon is equal to the distance between Landau levels. So nonresonant case is located between two neighboring resonances.

We consider the process near threshold, so frequencies of initial and final photons are

$$\omega = 2m + amh^2, \quad \omega' = kmh^2. \quad (1)$$

Total probability of the process per unit of time in LLL approximation has the form

$$W = \alpha^2 \frac{4\pi^2}{3} mh^4 e^{-2/h} \sqrt{a} \left( \ln\left(\frac{a}{k_{\min}}\right) + \frac{16a}{3} \right), \quad (2)$$

where  $h = eH/m^2$  is normalized magnetic field.

This value is equal to

$$W \approx 10^6 s^{-1} \quad (3)$$

for  $a = 1$ ,  $h = 0.1$  and it is three order of magnitude greater than resonant probability.

Performed within state budget subject № 367-07 "Resonances and structure transformations in quantum electrodynamics, chromodynamics and many particle systems upon the influence of external fields and fast particle beams".

### References

1. P. I. Fomin and R. I. Kholodov // Problems of Atomic Science and Technology, V.3, C.179, 2007.
2. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskiy. Quantum Electrodynamics, 4th ed. (Nauka, Moscow, 1981; Wiley, New York, 1965).

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КВАТЕРНИОНОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ЭЛЕКТРОННОГО ОХЛАЖДЕНИЯ ПУЧКОВ ЧАСТИЦ

А.И. Кульментьев — Институт прикладной физики НАН Украины

Конференція Факультету Електроніки та інформаційних технологій Сумського державного університету "Фізика, електроніка та електротехніка". Секція «Експериментальна фізика». 18 – 22 квітня 2011 року. – Суми: Изд-во СумДУ. – 2011. – С.114–115.

**Абстракт** – В работе введено представление об обобщенном кинематическом множителе для частицы, испытавшей два последовательных упругих столкновения, в рамках теории гиперкомплексных чисел разработан формализм для его вычисления, создано необходимое программное обеспечение и исследованы характерные особенности распределения энергии многократно рассеянной частицы.

На ускорителях в экспериментах с неподвижными мишенями энергия частиц пучка превращается в основном в энергию совместного движения продуктов реакции, и лишь незначительная ее часть переходит в энергию рождающихся частиц. Поэтому образование новых частиц с большими массами возможно лишь в экспериментах со встречными пучками, в которых удается использовать всю энергию начального движения сталкивающихся частиц.

В таких экспериментах очень важно, чтобы приготавливаемые пучки были монохроматическими и хорошо коллимированными, т.е. в системе отсчета, движущейся со средней скоростью частиц пучка, они должны иметь узкое распределение по скоростям вблизи нулевого значения.

В последнее время для приготовления пучков тяжелых заряженных частиц широко используется метод электронного охлаждения. В этом методе в одном из прямолинейных промежутков накопителя параллельно пучку тяжелых частиц пропускается интенсивный пучок электронов с той же средней скоростью и малым разбросом по импульсам. На общем участке траектории "горячий" газ тяжелых частиц оказывается в "холодном" электронном газе и в результате кулоновских столкновений охлаждается. При этом обычно различают два процесса: однократные столкновения, которые приводят к охлаждению, и многократные, вызывающие нагревание газа частиц. При теоретическом описании эти противоположные процессы рассматриваются по отдельности, что

связано с отсутствием теории, позволяющей обобщить формализм однократного рассеяния на случай нескольких последовательных столкновений.

В данной работе предлагается для разработки подобного обобщения использовать гиперкомплексные числа – кватернионы. В случае сферически симметричного потенциала отдельное столкновение в определенном смысле сводится к повороту вектора скорости частицы в орбитальной плоскости на угол рассеяния. Поэтому для описания нескольких последовательных столкновений необходим формализм, в котором можно эффективно складывать подобные повороты.

По определению, кватернионы образуют 4-мерную алгебру над полем  $R$  действительных чисел. Эта единственная ассоциативная некоммутативная алгебра над  $R$  без делителей нуля. В кватернионе можно выделить скалярную и векторную части, причем умножение кватернионов объединяет в себя два вида умножения векторов (скалярное и векторное).

Можно показать, что при повороте вокруг оси  $\mathbf{p}$  на угол  $2\varphi$  произвольный вектор  $\mathbf{v}$  переходит в вектор  $\mathbf{q}\mathbf{v}\mathbf{q}^{-1}$ , где кватернион  $\mathbf{q}$  имеет вид  $\mathbf{q} = \cos\varphi + \mathbf{p}\sin\varphi$ . Поэтому, если производится два поворота: первый на угол  $2\varphi_1$  вокруг оси, характеризуемой единичным вектором  $\mathbf{p}_1$ , и затем второй – на угол  $2\varphi_2$  вокруг оси, характеризуемой вектором  $\mathbf{p}_2$ , то в итоге получается некоторый новый поворот. Используя кватернионы можно сравнительно просто найти ось  $\mathbf{p}$  и угол  $2\psi$  результирующего поворота:  $\mathbf{q}_2\mathbf{q}_1 = \cos\psi + \mathbf{p}\sin\psi$ .

По аналогии со случаем однократного рассеяния в данной работе введено представление об обобщенном кинематическом множителе для частицы, испытавшей два последовательных упругих столкновения, разработан формализм и создано необходимое программное обеспечение. В рамках предложенного подхода исследованы характерные особенности кинематического множителя. В частности, показано, что в эксперименте, в котором фиксированы направления движения падающей и двукратно рассеянной частицы, существует интервал возможных значений энергии такой частицы. Установлено, что экстремальные значения энергии имеют частицы, испытывающие оба акта рассеяния в одной и той же орбитальной плоскости.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы «Полевые подходы к проблемам ядерной физики и энергетики на базе квантовой хромодинамики и исследования

электродинамических процессов и структурных эффектов при взаимодействии пучков частиц с полями и веществом» (2007-2011 гг.).

## ОПИСАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ КОМПАКТНЫХ НАНООБЪЕКТОВ

**А.И.Кульментьев — Институт прикладной физики НАН Украины**

**Вышла в журнале // Математическое моделирование, 2011. – Т.23, № 4. – С.57 – 68.**

**Абстракт** В статье предложен численный метод идентификации и анализа поверхности компактных атомных нанобъектов. Проведен анализ алгоритмов, разработано необходимое программное обеспечение и на примере модельных кластеров проведено его тестирование. Метод обеспечивает одновременное однозначное определение атомов поверхности и ее мозаичное представление, которое затем может быть использовано для вычисления различных интегральных характеристик рассматриваемого объекта.

Одним из основных направлений исследований в Институте является компьютерное моделирование эволюции под облучением дефектной структуры материалов атомной энергетики. Современный подход к решению этой задачи состоит во введении представления о структурных уровнях системы и использовании физических моделей и методов компьютерной физики, адекватных для описания явлений, происходящих на отдельных уровнях. К настоящему времени в многоуровневом моделировании оформились два направления – последовательные и гибридные схемы. В последовательных схемах структурный элемент модели данного уровня рассматривается в виде системы, составленной из элементов модели более низкого уровня. Поэтому переход к следующему уровню приводит к уменьшению числа степеней свободы и, как следствие, описание поведения системы фиксированного размера в течение заданного промежутка времени требует меньших вычислительных затрат. Это обстоятельство позволяет при переходе на более высокие уровни рассматривать системы большего размера в течение большего промежутка времени.

Реакторное материаловедение является одной из наиболее перспективных областей применения последовательных схем, поскольку при экспериментальном исследовании поведения конструкционных материалов в активной зоне реактора наблюдается объединение первичных

радиационных дефектов – вакансий, межузельных и примесных атомов в разнообразные нанокластеры – вакансионные поры, дислокационные петли и примесные выделения.

В статье предложен численный метод идентификации и анализа поверхности таких атомных образований, который является достаточно простым, эффективным, устойчивым и допускает наглядную геометрическую интерпретацию. Обязательным этапом реализации любого численного метода является его тестирование. Эта процедура выполнена на примере модельных кластеров с хорошо определенной поверхностью. Результаты тестирования не только доказали корректность предлагаемого метода, но и позволили установить некоторые качественные особенности оценок площади поверхности и объема малых атомных систем.

Существует несколько областей, в которых может быть использован разработанный метод. Во-первых, в традиционном материаловедении многие процессы, имеющие огромное технологическое значение, часто связаны с выделением и эволюцией локальных атомных образований. Предложенный метод позволяет установить связь между атомистическим и мезоскопическим уровнями при компьютерном моделировании таких процессов, поскольку он обеспечивает на атомном уровне как однозначное определение атомов поверхности, так и ее мозаичное представление. Это представление может быть использовано для вычисления различных интегральных характеристик, которые фигурируют на мезоскопическом уровне. Кроме того, его можно применять при исследовании атомных кластеров, которые являются одним из наиболее интересных объектов нанозифики.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы № 367-07 «Полевые подходы к проблемам ядерной физики и энергетики на базе квантовой хромодинамики и исследования электродинамических процессов и структурных эффектов при взаимодействии пучков частиц с

полями и веществом» (2007-2011 гг.).

## **СТРУКТУРА И СВОЙСТВА НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ ИЗ НИТРИДА ТИТАНА, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ НЕПРЕРЫВНОМ ОСАЖДЕНИИ ИЛИ ИОННО-ПЛАЗМЕННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ**

**А.И.Кульментьев — Институт прикладной физики НАН Украины;  
О.П.Кульментьева, А.М.Махмуд — Сумский государственный университет МОН  
Украины**

**Вышла в журнале // Компрессорное и энергетическое машиностроение. – 2011 – №2 (24). – С.36-39.**

**Абстракт** В статье проведено комплексное теоретическое и экспериментальное исследование и сравнение трибологических свойств, структурно-фазового состава и морфологии поверхности покрытий из TiN, нанесенных в условиях непрерывного осаждения или ионно-плазменной имплантации.

Одно из основных направлений исследований в Институте связано с использованием пучков частиц для анализа структуры и состава сравнительно тонкой приповерхностной области материалов. В последнее время потоки энергетических заряженных частиц – электронов, ионов или потоков плазмы – активно используются также для целенаправленного изменения свойств материалов, а именно, тонкого поверхностного слоя обрабатываемого изделия. Особое внимание к этой области твердых тел является одной из характерных черт современного материаловедения. Это объясняется тем, что структура и состав поверхности определяют многие физические и химические свойства твердых тел и играют главную роль во многих процессах и явлениях, часто имеющих огромное

технологическое значение. Кроме того, резкое увеличение относительной доли атомов, лежащих на поверхности, по сравнению с полным числом атомов системы, является также одной из характерных черт объектов нанонауки.

В статье проведено комплексное теоретическое и экспериментальное исследование покрытий из TiN, нанесенных в условиях непрерывного осаждения или ионно-плазменной имплантации. В частности установлено, что независимо от режимов осаждения в покрытиях имеются поры, которые могут быть двух типов: открытые на поверхности и закрытые внутри покрытия. Предложен физический механизм, объясняющий влияние пор на трибологические свойства покрытий. Кроме того, проанализировано влияние закрытых пор на длительную износостойкость модифицированного материала, работающего в паре трения.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы «Полевые подходы к проблемам ядерной физики и энергетики на базе квантовой хромодинамики и исследования электродинамических процессов и структурных эффектов при взаимодействии пучков частиц с полями и веществом» (2007-2011 гг.).

# THRESHOLD ELECTRON-POSITRON PAIR PRODUCTION BY A POLARIZED ELECTRON IN A STRONG MAGNETIC FIELD

O.P. Novak, R. I. Kholodov — Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine

Sent (10.2011) in journal *Problems of Atomic Science and Technology*.

**Abstract** — Resonant  $e^+e^-$ -pair production by an electron in a magnetic field near the process threshold is analytically studied. Using the Nikishov's theorem an estimation of the number of events is made in magnetic field equivalent to laser wave in the SLAC experiment [1].

## 1. Introduction

The measure of strong field in QED is the critical Schwinger one  $B_c = m^2 c^3 / e\hbar \approx 4.4 \cdot 10^{13}$  G. When magnetic field is comparable with the critical one, the quantum electrodynamical treatment of processes is necessary.

Neutron stars have magnetic field within the range from  $10^{12}$  G to  $10^{13}$  G. Thus, QED processes in a magnetic field are of great importance in astrophysics. It is necessary to mention the possibility to study QED processes in subcritical magnetic field in experiments on heavy ion collisions [2].

Strong magnetic field modifies physical processes and allows occurring new ones, like  $e^+e^-$  pairproduction by a moving electron. It is necessary to notice that this reaction in intense *laser* field was experimentally studied at SLAC [1].

## 2. Process rate

Probability amplitude of the process is described by two Feynman diagrams shown in Fig. 1, where double lines represent Dirac equation solutions in a magnetic field.

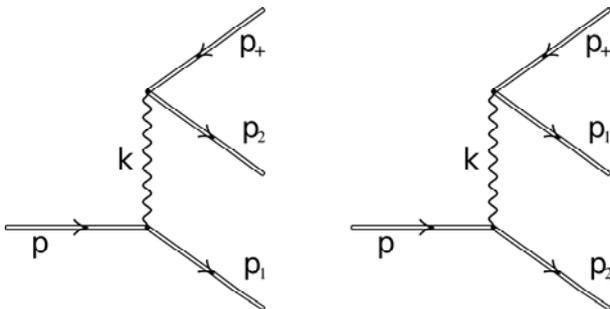


Fig. 1. Feynman diagrams of the process.

We assume the following condition is met:

$$b = \frac{B}{B_c} \ll 1. \quad (1)$$

The process has been considered near the threshold when the final particles occupy ground Landau levels and the initial electron energy is:

$$E = 3mc^2 \quad (2)$$

(hereinafter relativistic units with  $\hbar = c = 1$  are used) and the final particles occupy the ground Landau level. Thus, the final spin states are determined.

When process kinematics allows the virtual photon to be real then a resonant divergence arises. In this case the interaction range goes to infinity [3].

The divergence was eliminated by introducing small imaginary part into the propagator denominator using Breit-Wigner prescription:

$$\omega \rightarrow \omega - i \frac{\Delta}{2} \quad (3)$$

where  $\Delta$  is the corresponding state width.

Nonresonant contribution to the process can be neglected in comparison with the resonant part. Total process rate in the considered case is

$$W = \alpha^2 \left( \frac{mc^2}{\hbar} \right) \frac{\sqrt{\pi}}{3\sqrt{3}} \frac{\Omega^{2l-1} e^{-2\Omega^2}}{\Delta/m} \frac{\Gamma(l+1/2)}{(l!)^2} \quad (4)$$

where  $\Omega = 2/b$  and  $l$  is Landau level number of the initial electron. Note that the rate (4) can be expressed via product of the rates of the corresponding first-order processes.

Nikishov's theorem allows to compare the obtained result (4) with the SLAC experiment on observation of  $e^+e^-$  pairproduction by an electron in intense laser wave.

The estimated according to Eq. (4) number of events is  $N \approx 80$ . It is in reasonable agreement with the experimental result of  $106 \pm 14$  events indicated in [1].

Performed within state budget subject № 367-07 "Resonances and structure transformations in quantum electrodynamics, chromodynamics and many particle systems upon the influence of external fields and fast particle beams".

## References

1. D. L. Burke et al. // *Phys. Rev. Lett* **79**, p.1626, 1997.
2. P. I. Fomin, R. I.Kholodov. // *Reports of National academy of sciences of of Ukraine*, **12**, p. 91, 1998.
3. C. Graziani, A. K. Harding, R. Sina, *Phys. Rev. D* **51**, p. 7097, 1995.

## РЕЗОНАНСНОЕ ФОТОРОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОЙ ПАРЫ НА ЯДРЕ В ИМПУЛЬСНОМ СВЕТОВОМ ПОЛЕ

А.А. Лебедь, С.П. Рошупкин — Институт прикладной физики НАН Украины

Статья вышла в журнале ЖЭТФ, 2011, том 139, вып.5, стр.1-10 / JETP, 2011, Vol.113, №.1, pp. 46–54.

**Абстракт** — Теоретически изучен процесс резонансного фоторождения электрон-позитронной пары на ядре в поле импульсной световой волны.

Рассмотрено приближение, когда длительность электромагнитного импульса значительно больше характерного времени осцилляций волны. Взаимодействие электрона и позитрона с кулоновским потенциалом ядра рассмотрено в борновском приближении. Для диапазона умеренно сильных интенсивностей внешнего поля получено аналитическое выражение для резонансного дифференциального сечения. Показано, что резонансное сечение фоторождения пар на ядре в импульсном лазерном поле может на порядок величины превышать соответствующее сечение фоторождения пар на ядре в отсутствие внешнего поля.

Фоторождение пары (ФРП) электрона и позитрона в поле атомного ядра является одним из основных процессов взаимодействия гамма-квантов с веществом. Характерной особенностью процесса ФРП во внешнем лазерном поле есть возможность резонансного характера его протекания [1]. Исследование резонансных процессов в импульсных полях актуально в связи с широким применением импульсных лазеров в практике современного эксперимента.

Диаграммы Фейнмана процесса ФРП на ядре в поле импульсной световой волны представлены на Рис.1. Двойные свободные линии обозначают волновые функции электрона  $p_-$  и позитрона  $p_+$  в поле волны, внутренние линии – функцию Грина электрона  $q_-$  (позитрона  $q_+$ ) в поле волны, волнистые линии отвечают падающему  $\gamma$ -кванту  $k_i$  и "псевдофотону"  $q$  отдачи ядра.

Амплитуда исследуемого процесса имеет вид суммы по парциальным компонентам, каждая из которых отвечает процессам при участии определенного числа фотонов внешнего поля. Амплитуда содержит резонансный знаменатель, в котором присутствует характерная только для импульсных внешних полей зависимость.

Резонанс для процесса ФРП в импульсном световом поле имеет место при пороговой энергии падающего фотона значительно большей удвоенной энергии покоя электрона.

Резонансное ФРП в импульсном световом поле, эффективно сводится к двум последовательным процессам первого порядка по постоянной

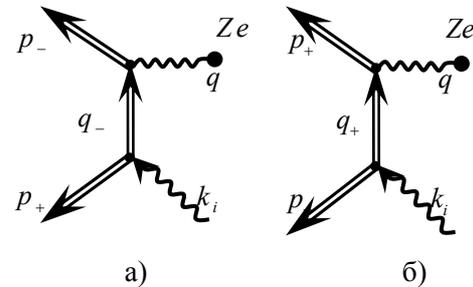


Рис.1.

тонкой структуры: однофотонному рождению пары в поле импульсной волны и рассеянию электрона на ядре в поле импульсной волны.

Резонансное сечение имеет следующую характерную структуру

$$d\sigma_{lres}^{(\pm)} \sim P_{res} \cdot d\sigma_s \cdot dW_{pair}^{(1)}, \quad (1)$$

где  $d\sigma_s$  – дифференциальное сечение рассеяния промежуточного электрона на ядре,  $dW_{pair}^{(1)}$  – вероятность рождения начальным фотоном электрон-позитронной пары за счет поглощения одного фотона внешнего поля.

Отношение резонансного сечения к сечению в отсутствие внешнего поля имеет вид

$$R_{res} = \pi^{3/2} 2^{-7/2} \eta_0^2 \omega \tau \cdot (\ln E_+ / m). \quad (2)$$

Оценка отношения сечений (2) для пикосекундного Nd:YAG лазера серии PICAR: напряженность  $\eta_0 \approx 0.1$ , длина волны  $\lambda = 1064$  нм, длительность  $\tau = 25$  пс. Падающий фотон движется навстречу волне с энергией вблизи порогового значения  $\omega_i = 255$  ГэВ. Получим  $R_{res} \approx 40$ . Следовательно, резонансное сечение ФРП на ядре в импульсном световом поле на порядок величины может превышать сечение ФРП на ядре в отсутствие внешнего поля.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Когерентные и резонансные квантово-электродинамические явления в сильных лазерных полях”.

### Список послань

1. С.П. Рошупкин, А.И. Ворошило, Резонансные и когерентные эффекты квантовой электродинамики в сильных световых полях, Наукова думка, Київ, (2008).

## HEAVY NUCLEI CONFINEMENT EFFECT IN A PULSED LIGHT FIELD

**S.S. Starodub, S.P. Roshchupkin — Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine**

Published in journal *Laser Physic*, 2011, Vol.21, No.4, pp. 769-773.

**Abstract** — Outside the framework of the dipole approximation (with an accuracy of about  $v/c$ ) the effective interaction force between stripped uranium nuclei in the presence pulsed field of two laser waves extending towards each other is theoretically studied [1].

### 1. The effective interaction force

Let's investigate interaction of the two classical nonrelativistic heavy nuclei with charges  $q_1$  and  $q_2$ , moving towards to each other along the axis  $x$  in the pulsed field of two opposite laser waves, extending along the axis  $z$ .

Further, the system of equations for relative motion of the uranium nuclei and the projection of the effective force of nuclei interaction to a direction of the relative particles motion was solved numerically. Initial conditions for laser waves the following. Frequencies of waves were set by the equal:  $\omega_1 = \omega_2 = \omega = 3,57 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$  ( $\hbar\omega = 2.35 \text{ eV}$ ); the laser pulse durations correspond to picoseconds lasers:  $t_1 = t_2 = 1,5 \cdot 10^{-12} \text{ s}$ . The oscillation velocity varied in the range from  $10^{-3}$  to  $10^{-1}$  magnitudes of velocity of light in free space. It corresponds to fields strength from  $10^{11}$  to  $10^{13} \text{ V/cm}$ .

Calculations have shown that in all range of the oscillation velocities we can observe the effect of an attraction of uranium nuclei.

Till the moment of the closest approach of uranium nuclei, external field influence on a motion of particles very little (see the left part of a Fig. 1). It is caused by a select of initial conditions, at which the external field does not resist to closest approach of uranium nuclei on distances, comparable with "Coulomb" ( $\bar{\xi} \approx 10^{-3} \lambda$ ), i.e. such on which particles can approach without an external field.

After the closest approach the force of Coulomb repulsion is great and nuclei start to go away from each other. Thus, with magnification of the relative distance between nuclei, the force of Coulomb repulsion promptly decreases, and the force caused by an external laser field increases. There is an attraction of magnetic current generated by strength of a magnetic field of the first and second wave. As a result of it effective force of interaction becomes an attractive force and uranium nuclei go away from

each other much more slowly. Thus, the nuclei confinement effect (see the right part of a Fig. 1) takes place.

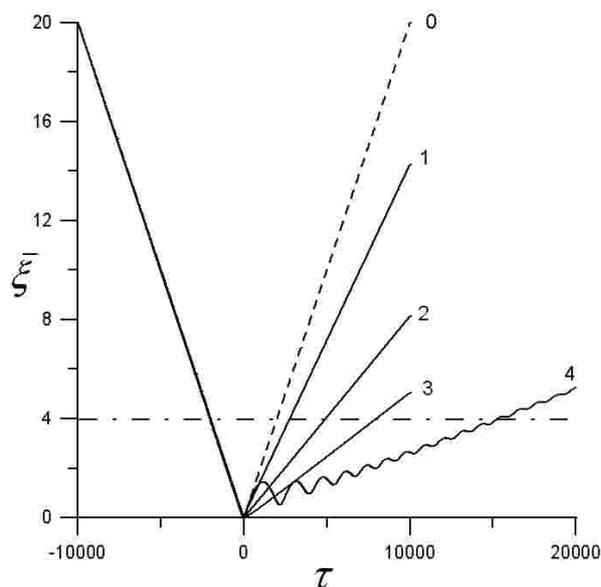


Fig. 1

On Figure1 the averaged relative distance  $\bar{\xi}$  in units  $\lambda$  vs. time  $\tau$  for  $\eta_1 = 10^{-3}$  and various values of nuclei oscillation velocity in second wave. The dashed line – 0 on figures corresponds to interaction of nuclei without external field influence ( $\eta_1 = \eta_0 = 0$ ). Full lines 1, 2, 3, 4 correspond to oscillation velocities, respectively  $\eta_2 = 2.9 \cdot 10^{-2}$ ,  $\eta_2 = 2.2 \cdot 10^{-2}$ ,  $\eta_2 = 1.6 \cdot 10^{-2}$ ,  $\eta_2 = 2 \cdot 10^{-3}$ .

Performed within state budget subject "Coherent and resonant quantum electrodynamics phenomena in strong laser field".

### References

1. S.S. Starodub, S.P. Roshchupkin. Heavy nuclei confinement effect in a pulsed light field // *Laser Physics*, Vol. 21, No. 4, pp. 769-773.

## NON-LINEAR EFFECTS AT IONIZATION OF HYDROGEN ATOMS IN THE STRONG PULSED LIGHT FIELD

**S.S. Starodub, S.P. Roshchupkin — Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine**

**Sent (10.2011) in journal Problems of Atomic Science and Technology.**

**Абстракт** — Outside the framework of the dipole approximation (with an accuracy of about  $v/c$ ) the effective interaction force between hydrogen ions (atoms after ionization), can become an attractive force on certain time intervals in the presence of the pulsed laser field. As a result the pulsed laser field can slow down backward motion of ions in 6 times.

### 1. The effective interaction force

Let's investigate interaction of the two classical nonrelativistic hydrogen atoms  $q_1$  and  $q_2$  (the charge of atoms  $q=0$ , but after ionization  $q=+e$ ), moving towards to each other along the axis  $x$  in the pulsed field of two opposite laser waves, extending along the axis  $z$ .

Further, the system of equations for relative motion of the hydrogen atoms and the projection of the effective force of atoms interaction to a direction of the relative particles motion was solved numerically. Initial conditions for laser waves the following. Frequencies of waves were set by the equal:  $\omega_1 = \omega_2 = \omega = 3 \cdot 10^{19} \text{ s}^{-1}$  ( $\hbar\omega = 19,7 \text{ keV}$ ); the laser pulse durations correspond to femtoseconds lasers:  $t_1 = t_2 = 1,5 \cdot 10^{-16} \text{ s}$ . The oscillation velocity varied in the range from  $10^{-3}$  to  $10^{-2}$  magnitudes of velocity of light in free space. It corresponds to fields strength from  $10^{11}$  to  $10^{12} \text{ V/cm}$ .

Calculations have shown that in all range of the oscillation velocities we can observe the effect of an attraction of of atoms after they ionization.

Till the moment of the closest approach of atoms, external field influence on a motion of particles very little (see the left part of a Fig. 1). It is caused by a select of initial conditions, at which the external field does not resist to closest approach of atoms on distances, comparable with "Coulomb" ( $\bar{\xi} \approx 10^{-3} \lambda$ ), i.e. such on which particles can approach without an external field.

After approach to the several atoms distance the external field is on and we have ionization of atoms. After actually a stopping of ions, the force of Coulomb repulsion decreases much rather, than the force caused by an external laser field. There is a magnetic current generated by strength of a magnetic field of the first and second wave. It compensate the Coulomb repulsion and does not allow hydrogen ions

promptly to go away from each other (see the right part of the Fig. 1). It is visible that in the presence of a pulsed field the ions leave from each other much more slowly. Deceleration can reach six times. (see the right part of a Fig. 1).

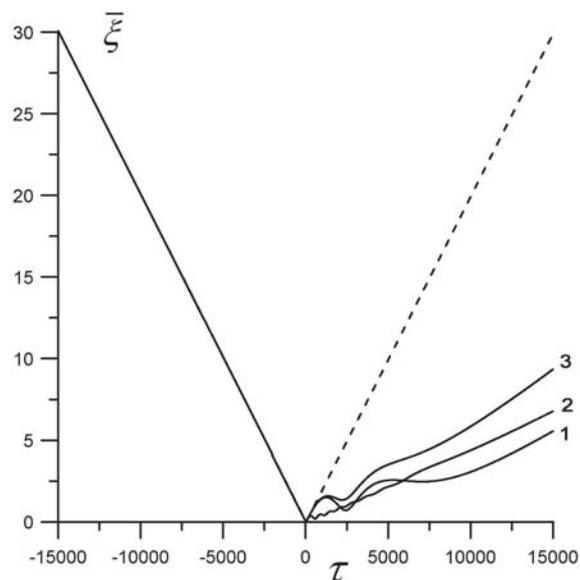


Fig. 1

On Figure 1 the averaged relative distance  $\bar{\xi}$  in units  $\lambda$  vs. time  $\tau$ . The dashed line – 0 on figures corresponds to interaction of atoms without external field influence ( $\eta_1 = \eta_0 = 0$ ). Full lines 1, 2, 3 correspond to oscillation velocities, respectively  $\eta_1 = 10^{-3}$ ,  $\eta_2 = 2 \cdot 10^{-3}$ ;  $\eta_1 = 3 \cdot 10^{-3}$ ,  $\eta_2 = 7 \cdot 10^{-3}$ ;  $\eta_1 = 8 \cdot 10^{-3}$ ,  $\eta_2 = 9 \cdot 10^{-3}$ .

Performed within state budget subject "Coherent and resonant quantum electrodynamics phenomena in strong laser field".

## РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЙВАНИЕ ФОТОНА НА ЭЛЕКТРОНЕ В ИМПУЛЬСНОМ ПОЛЕ

А.И. Ворошило, С.П. Рощупкин, В.Н. Недорешта – Институт прикладной физики НАН Украины

Статья вышла в журнале *Laser Physics*, 2011, V. 21, No. 9, pp. 1675-1687.

**Абстракт** – Исследован процесс рассеивания фотона на электроне (Комптон-эффект) в поле слабоинтенсивной импульсной лазерной волны циркулярной поляризации, длительность импульса которой значительно больше, чем характерное время осцилляций.

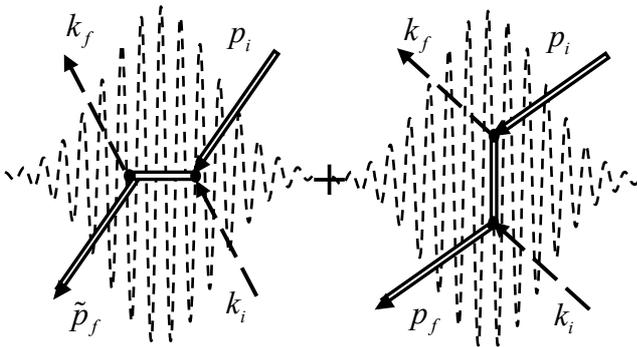


Рис. 1 Фейнмановская диаграмма процесса

В качестве модели импульсной лазерной волны использована плоская электромагнитная волна с огибающей [1].

Характер процессов взаимодействия электрона с полем плоской электромагнитной волны описывается классическим инвариантным параметром  $\eta$  [2]. При выполнении условия  $\eta \ll 1$  (такая волна является слабоинтенсивной) достаточно учесть взаимодействие электрона лишь с несколькими фотонами.

В разложении амплитуды процесса по малому параметру  $\eta$  слагаемые, пропорциональные нулевой степени  $\eta$ , определяют амплитуду Комптон-эффекта в отсутствие внешнего поля. Слагаемые, пропорциональные первой степени параметра  $\eta$ , определяют поправки, обусловленные участием в процессе одного фотона волны, а слагаемые, пропорциональные второй степени параметра  $\eta^2$ , – двух фотонов волны.

Параметр

$$\beta = \frac{q^2 - m^2}{4(kq)} \varphi_0, \quad (1)$$

где  $q$  – 4-импульс промежуточного фотона (в общем случае  $q^2 \neq m^2$ ),  $m$  – масса электрона,  $k$

– волновой вектор,  $\varphi_0 = 2\pi t_{\text{imp}} / T \gg 1$  – пропорционален количеству осцилляций в импульсе, позволяет классифицировать процессы, присутствующие в разложении амплитуды по малому параметру  $\eta$  следующим образом:

1. Процессы, допускающие резонансное течение, т.е. те, в которых виртуальная частица может попасть на массовую оболочку. Для них выполняется условие  $\beta \lesssim 1$ . Резонансное протекание процесса связано с выходом промежуточной частицы (электрона или позитрона) в поле импульсной световой волны на массовую оболочку ( $q^2 \rightarrow m^2$ ).

2. Процессы, не допускающие резонансного течения. Для них  $\beta \gg 1$ .

Резонанс может иметь место как для прямой, так и для обменной амплитуды. Вследствие очень узкой кинематической области, в которой проявляется резонанс обменной диаграммы, его вкладом в полную вероятность можно пренебречь. В этом случае полная вероятность Комптон-эффекта в поле слабой импульсной световой волны определяется резонансом только прямой амплитуды

Показано, что резонансная вероятность Комптон-эффекта в поле слабоинтенсивной световой волны может на несколько порядков величины превышать соответствующую вероятность без внешнего поля. Полученные результаты могут быть подтверждены в экспериментах по проверке квантовой электродинамики в сильных полях, например, на SLAC и FAIR.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Когерентные и резонансные квантовоэлектродинамические явления в сильных лазерных полях”.

### Список литературы

1. N. V. Narozhny and M. S. Fofanov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **110**, 26 (1996) [*JETP* **83**, 14 (1996)].
2. С.П. Рощупкин, А.И. Ворошило, Резонансные и когерентные эффекты квантовой электродинамики в сильных световых полях, Наукова думка, Київ, (2008).

## **ЭФФЕКТЫ СИЛЬНОГО ИМПУЛЬСНОГО СВЕТОВОГО ПОЛЯ В ПРОЦЕССАХ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ**

**С.П. Рощупкин, А.А. Лебедь— Институт прикладной физики НАН Украины**

**Статус работы: Монография принята к печати в издательстве «Наукова думка», г. Киев, 2011 г., 212 стр. (на русском языке).**

**Абстракт** – Монография посвящена исследованию влияния сильного импульсного светового поля на квантовоэлектродинамические процессы.

В монографии рассмотрены основные процессы квантовой электродинамики первого и второго порядков по постоянной тонкой структуры в сильных импульсных лазерных полях, такие как: рассеяние электрона на ядре, спонтанное излучение электрона, спонтанное тормозное излучение электрона в поле ядра, фоторождение электрон-позитронных пар в поле ядра, рассеяние лептона на лептоне, Комптон-эффект и другие. Показано существенное влияние на электродинамические процессы импульсного лазерного поля. Детально изучены резонансные эффекты в процессах второго порядка по постоянной тонкой структуры, связанные с выходом промежуточной частицы в импульсном лазерном поле на массовую оболочку. Показано, что ширина и амплитуда резонансного пика определяются частотой и временем импульса лазерной волны, а также кинематическими

характеристика процесса. При этом, резонансные поперечные сечения рассеяния могут на несколько порядков величины превышать соответствующие поперечные сечения рассеяния без внешнего лазерного поля.

Детально изучены нерезонансные процессы квантовой электродинамики в сильном импульсном поле. Показано, что в сильных полях, когда скорость осцилляций электрона сравнима с его скоростью поступательного движения, нерезонансное поперечное сечение рассеяния может в несколько раз отличаться от соответствующего поперечного сечения рассеяния без внешнего поля. Отмечен эффект аномального усиления лазерного поля в процессе рассеяния нерелятивистских электронов на ионах в умеренно-сильном лазерном поле. Детально рассмотрена природа этого эффекта.

Показана возможность экспериментальной проверки представленных эффектов в международных проектах по проверке квантовой электродинамики в сильных лазерных полях.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “ Когерентные и резонансные квантовоэлектродинамические явления в сильных лазерных полях ”.

## **RESONANT EFFECTS OF QUANTUM ELECTRODYNAMICS IN THE PULSED LIGHT FIELD**

**Sergei Roshchupkin, Alexandr Lebed', Elena Padusenko and Aleksey Voroshilo – Institute of Applied Physics, NASU Ukraine**

**Chapter 'RESONANT EFFECTS OF QUANTUM ELECTRODYNAMICS IN THE PULSED LIGHT FIELD' (50 pages) has been prepared for the book Quantum Optics (ISBN 978-953-307-937-0) which will be published by INTECH - Open Access Publisher University Campus STeP Ri Croatia in 2012.**

Abstract – The review on the resonant processes of quantum electrodynamics (QED) proceeding in the strong pulsed light fields, realised in modern powerful pulsed lasers is presented.

The resonant character relates to the fact that the lower order processes, such as spontaneous emission or one-photon creation and annihilation of electron-positron pairs, may be allowed in the field of a light wave. Therefore, within a certain range of the energy and momentum, a particle in an intermediate state may fall within the mass shell. Then, the considered higher order process is effectively reduced to two sequential lower order processes. The appearance of resonances in a laser field is one of the fundamental problems of QED in electromagnetic fields.

Following QED processes of the second order in the fine structure constant in the pulsed laser field are considered: resonant spontaneous bremsstrahlung by an electron scattered by a nucleus, resonant photocreation of electron-positron pairs on a nucleus, resonant scattering of a lepton by a lepton, and resonant scattering of a photon by an electron. The resonant peak's altitude and width are defined by the external pulsed wave properties. It is demonstrated that the resonant cross sections may be several orders of magnitude greater than the corresponding cross sections in the absence of an external field. Results obtained may be experimentally verified, for example, by the scientific facilities at the SLAC National Accelerator Laboratory and FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research, Darmstadt, Germany).

Performed within state budget subject 'Coherent and resonant quantum electrodynamics phenomena in strong laser field'.

## НЕРЕЗОНАНСНОЕ ФОТОРОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОЙ ПАРЫ НА ЯДРЕ В ИМПУЛЬСНОМ СВЕТОВОМ ПОЛЕ

А.А. Лебедь, С.П. Рощупкин — Институт прикладной физики НАН Украины

Статья опубликована в журнале *Laser Physics*, 2011, Vol. 21, No. 9, pp. 1613–1620.

**Абстракт** — Теоретически изучен процесс нерезонансного фоторождения  $e^+ - e^-$  пары на ядре в поле импульсной световой волны. Рассмотрено приближение, когда длительность электромагнитного импульса значительно больше характерного времени осцилляций волны. Взаимодействие электрона и позитрона с кулоновским потенциалом ядра рассмотрено в борновском приближении. Для диапазона умеренно сильных интенсивностей внешнего поля получено нерезонансное дифференциальное сечения в случае релятивистских и нерелятивистских энергий частиц. Показано, что нерезонансное сечение фоторождения нерелятивистской пары на ядре в импульсном лазерном поле может в два раза превышать соответствующее сечение фоторождения пар на ядре в отсутствие внешнего поля.

Фоторождение пары (ФРП) электрона и позитрона в поле атомного ядра является одним из основных процессов взаимодействия гамма-квантов с веществом. Диаграммы Фейнмана процесса ФРП на ядре в поле импульсной световой волны представлены на Рис.1

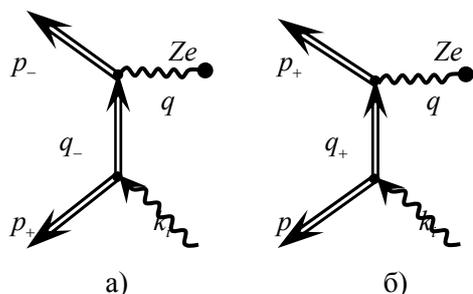


Рис.1.

Дифференциальное сечение рассеяния процесса ФРП на ядре в импульсном световом поле имеет вид суммы по парциальным компонентам

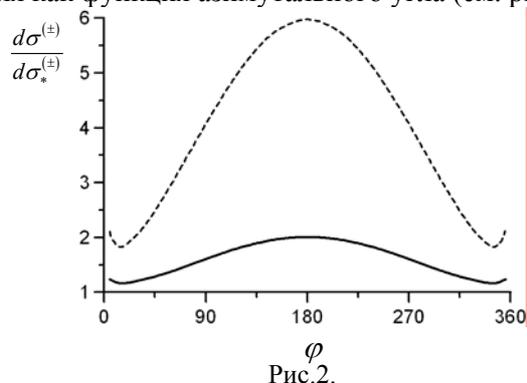
$$d\sigma^{(\pm)} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} d\sigma_l^{(\pm)}, \quad (1)$$

где  $d\sigma_l^{(\pm)}$  – парциальное дифференциальное сечение ФРП на ядре в импульсном световом поле. В случае релятивистских энергий пары парциальное сечение определяется как:

$$d\sigma_l^{(\pm)} = d\sigma_*^{(\pm)} \cdot W_l^{(\pm)}, \quad (2)$$

где  $d\sigma_*^{(\pm)}$  – дифференциальное сечение ФРП на ядре в отсутствие внешнего поля;  $W_l^{(\pm)}$  – вероятность вынужденного излучения или поглощения  $|l|$ -фотонов внешнего поля [1].

В случае нерелятивистских энергий данная факторизация не имеет места. Исследована зависимость отношения просуммированного по парциальным процессам сечения ФРП на ядре в импульсном поле к сечению ФРП в отсутствие поля как функция азимутального угла (см. рис.2).



Максимум отношения сечений соответствует вылету электрона и позитрона в одной плоскости с фотоном внешнего поля и начальным фотоном. Процессы с поглощением  $l \sim \gamma_0$  фотонов подавлены в случае импульсной волны, что приводит к существенному различию результатов для моделей монохроматической и импульсной волн (пунтирная и сплошная линия, соответственно).

В случае, когда электрон и позитрон рождаются с импульсами в плоскости, которая перпендикулярна направлению влета начального фотона, максимум распределения отвечает вылету электрона и позитрона вдоль одной линии в противоположных направлениях. В этом случае просуммированное по парциальным процессам нерезонансное сечение в два раза превышает соответствующее сечение в отсутствие внешнего поля.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Когерентные и резонансные квантово-электродинамические явления в сильных лазерных полях”.

### Список ссылок

- С.П. Рощупкин, А.И. Ворошило, Резонансные и когерентные эффекты квантовой электродинамики в сильных световых полях, Наукова думка, Київ, (2008).

## NONRESONANT QUANTUM ELECTRODYNAMICS PROCESSES IN A PULSED LASER FIELD

S. P. Roshchupkin, A.A. Lebed', E.A. Padusenko — National Academy of Sciences of Ukraine,  
Institute of Applied Physics

**Статус работы: Обзор (52 стр.) направлен в журнал «Laser Physics»**

**Абстракт** — В обзоре рассмотрены основные процессы квантовой электродинамики первого и второго порядков по постоянной тонкой структуры в сильных импульсных лазерных полях, такие как: рассеяние электрона на ядре, спонтанное излучение электрона, спонтанное тормозное излучение электрона в поле ядра, фоторождение электрон-позитронных пар в поле ядра, рассеяние электрона на мюоне. Было показано существенное влияние на электродинамические процессы импульсного лазерного поля. Детально изучены нерезонансные процессы квантовой электродинамики в сильном импульсном поле. Показано, что в сильных полях, когда скорость осцилляций электрона сравнима с его скоростью поступательного движения, нерезонансное поперечное сечение рассеяния может в несколько раз отличаться от соответствующего поперечного сечения рассеяния без внешнего поля. Полученные результаты могут быть экспериментально подтверждены на ускорителе SLAC (SLAC National Accelerator Laboratory) и в экспериментах по проверке квантовой электродинамики сильных полей в рамках проекта FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research, Darmstadt, Germany).

Рассмотрено приближение, когда длительность электромагнитного импульса значительно больше характерного времени осцилляций волны. Взаимодействие лептонов с кулоновским потенциалом ядра и друг с другом рассмотрено в борновском приближении. Для диапазона умеренно сильных интенсивностей внешнего поля получены аналитические выражения для дифференциальных сечений нерезонансных процессов в импульсном поле.

В течении последних нескольких лет было опубликовано несколько теоретических работ по изучению нерезонансных эффектов для основных процессов квантовой электродинамики [1-4]. Поэтому их систематизация и обобщение представляется весьма актуальным.

Отметим, что для диапазона умеренно сильных полей и релятивистских энергий частиц в случае нерезонансного протекания процессов энергетическим вкладом фотонов внешнего поля в законе сохранения можно пренебречь. В

результате при суммировании по всем парциальным излучения и поглощения фотонов внешнего поля все существенно квантовые вклады компенсируются и просуммированное сечение совпадает с сечением соответствующего процесса в отсутствие внешнего поля.

Качественно другая ситуация наблюдается в случае нерелятивистских энергий частиц. В этом случае энергетический вклад фотонов внешнего поля существенен.

Показано, что в этом случае просуммированное по всем парциальным процессам сечение может значительно отличаться от соответствующего сечения без внешнего поля.

Для процесса спонтанного тормозного излучения характер зависимости полного сечения от угла рассеяния электрона качественно меняется для различных энергий спонтанного фотона. Для “мягкого” спонтанного фотона полное сечение меньше сечения процесса без внешнего поля. Если же излучается “жесткий” спонтанный фотон с энергией, то в полном сечении для некоторого угла рассеяния появляется максимум. Сечение процесса спонтанного излучения жесткого фотона может в несколько раз превышать соответствующее сечение в отсутствие поля.

Показано, что просуммированное по парциальным процессам сечение процесса рождения пары больше сечения в отсутствие внешнего поля для всех значений азимутального угла. Максимум отношения сечений соответствует вылету электрона и позитрона в одной плоскости с фотоном внешнего поля и начальным фотоном. В этом случае просуммированное по парциальным процессам нерезонансное сечение в два раза превышает соответствующее сечение в отсутствие внешнего поля.

Влияние внешнего импульсного поля проявляется в подавлении процесса нерезонансного рассеяния нерелятивистских электрона на мюоне.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Когерентные и резонансные квантовоэлектродинамические явления в сильных лазерных полях”.

**Список ссылок**

1. Lebed' A. A., Roshchupkin S. P., Las. Phys. Lett., V. 5, № 6., (2008) P. 437-445.
2. Lebed' A. A., Roshchupkin S. P. Las. Phys. Lett., V. 6, № 6., (2009). P. 472-479.

3. Padusenko E.A., Roshchupkin S.P., Voroshilo A.I. Las. Phys. Letts. V. 6, № 8., (2009) P. 616—623.

**QUANTUM ELECTRODYNAMICS RESONANCES  
IN A PULSE LASER FIELD**

**Sergei Roshchupkin, Alexandr Lebed', Elena Padusenko, Alexey Voroshilo — National Academy of Sciences of Ukraine, Institute of Applied Physics**

**Статус работы: Обзор (55 стр) направлен в журнал «Reports on Progress in Physics»**

**Абстракт** — Проведён обзор теоретических работ по изучению резонансных процессов квантовой электродинамики в импульсном поле лазера. Рассмотрено приближение, когда длительность электромагнитного импульса значительно больше характерного времени осцилляций волны. Взаимодействие лептонов с кулоновским потенциалом ядра и друг с другом рассмотрено в борновском приближении. Для диапазона умеренно сильных интенсивностей внешнего поля получены аналитические выражения для дифференциальных сечений таких резонансных процессов в импульсном поле как: спонтанное тормозное излучение электрона на ядре, рождение электрон-позитронной пары фотоном на ядре, рассеяние лептона на лептоне, комптоновское рассеяние фотона на электроны. Показано, что резонансное сечение процесса в импульсном лазерном поле может на порядки величины превышать соответствующее сечение в отсутствие внешнего поля.

Характерной особенностью процессов второго порядка по постоянной тонкой структуры во внешнем лазерном поле есть возможность резонансного характера их протекания. Исследование резонансных процессов в импульсных полях актуально в связи с широким применением импульсных лазеров в практике современного эксперимента. В последние несколько лет было опубликовано несколько новых работ по изучению резонансных эффектов для основных процессов квантовой электродинамики [1-4]. Поэтому их систематизация и обобщение представляется весьма актуальным

Первый раздел обзорный. В разделе 2 рассмотрен процесс резонансного спонтанного излучения при рассеянии электрона на ядре в поле импульсного лазера. Определены условия, в которых имеет место резонансное протекание данного процесса. Показано, что для нерелятивистских и релятивистских энергий электронов отношение резонансного

дифференциального сечения к соответствующему сечению тормозного излучения электрона на ядре в отсутствие внешнего поля может достигать 5-6 порядков величины. Для ультрарелятивистских энергий электронов данное отношение сечений рассеяния резко уменьшается.

В разделе 3 изучен процесс резонансного рождения электрон-позитронной пары внешним фотоном в поле ядра и импульсной световой волны. Показано, что резонанс имеет место, когда энергия падающего фотона  $\omega_i$  больше некоторого порогового значения  $\omega_i > \omega_i^{th}$ , где  $\omega_i^{th} \sim 2m^2/\omega \gg 2m$ . Так, рожденные электрон и позитрон имеют ультрарелятивистские энергии. Оценки показывают, что резонансное сечение фоторождения пары на порядок величины может превышать соответствующее сечение в отсутствие внешнего поля.

В разделе 4 рассмотрен процесс рассеяния лептона на лептоне (электрона на электроны, электрона на позитроне, электрона на мюоне) в поле импульсного лазера в условиях резонанса. Анализ проводился для диаграмм рассеивательного типа. Резонансы имеют место при рассеянии лептонов на малые углы в системе центра инерции. Показано, что резонансное сечение рассеяния существенно превышает соответствующее сечение без внешнего поля. Наибольшее превышение (до пяти порядков) имеет место для процессов резонансного рассеяния электрона на электроны и позитроне.

В разделе 5 исследован резонансный процесс рассеивания фотона на электроны в поле слабоинтенсивной импульсной световой волны. Установлено, что резонансы имеют место, как для прямой, так и для обменной амплитуды. Вследствие очень узкой кинематической области для обменной диаграммы, ее вкладом в полную вероятность можно пренебречь. Показано, что резонансная вероятность Комpton-эффекта в поле

слабоинтенсивной световой волны может на несколько порядков величины превышать соответствующую вероятность без внешнего поля.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Когерентные и резонансные квантовоэлектродинамические явления в сильных лазерных полях”.

## AMPLIFICATION OF ELECTROMAGNETIC FIELD IN THE ULTRARELATIVISTIC ELECTRON SCATTERING BY ION IN A LIGHT WAVE

V.A. Tsybulnik, S.P. Roshchupkin – National Academy of Sciences of Ukraine, Institute of Applied Physics.

Published in Books of Abstracts 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics QEDSP2011, 2011, pp. 81-82.

**Abstract** — The electromagnetic field amplification constant in the scattering of the ultrarelativistic electrons by ions in the elliptically polarized light wave is theoretically studied for the medium intensities of light wave. We study the gain coefficient in the scattering of ultrarelativistic electrons by ion in the presence of the field of a plane electromagnetic wave of the medium intensities. In this case the known Bunkin- Fedorov multiphoton quantum parameter [1] is:

$$\gamma_i \sim 1 \quad (1)$$

The scattering of ultrarelativistic electron occurs in a narrow cone along a direction of the light wave propagating. It is shown that the gain coefficient is defined by the formula

### Список послань

1. Lebed' A A and Roshchupkin S P 2010 Phys. Rev. A. 81 033413(1-13).
2. Padusenko E A and Roshchupkin S P 2010 Las. Phys. 20(12) 2080.
3. Lebed' A A and Roshchupkin S P 2011 JETP 113(1) 46.
4. Voroshilo A I, Roshchupkin S P and Nedoroshta V N 2011 Las. Phys. 21(9) 1675.

$$\mu = \mu_0 \frac{E_i}{mc^2} \cdot B_i \quad (2)$$

where  $\mu_0 = \text{const}$ ,  $E_i$  is the electron energy,  $mc^2$  is the rest energy of an electron,  $B_i$  is the function which has a sharp maximum. In consequence of the amplification effect, the electric field strength can increase on some order of values. This effect is caused by the ultrarelativistic electron radiation of a great number of the stimulated photons of a wave. Results obtained may be experimentally verified, for example, by the scientific facilities at the SLAC National Accelerator Laboratory and FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research, Darmstadt, Germany).

Performed within state budget subject “Coherent and resonant quantum electrodynamics phenomena in strong laser field”.

### References

1. M.V.Fedorov. An Electron in a Strong Light Field, Moscow, Russia: Nauka, 1991.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КЛАССИЧЕСКИХ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИХ ОДНОИМЕННО ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В СИЛЬНЫХ ИМПУЛЬСНЫХ СВЕТОВЫХ ПОЛЯХ.

С.С. Стародуб, С.П. Рощупкин — Институт прикладной физики НАН Украины

**Статус работы:** обзор подготовлен к печати в журнал «*Laser Physics*», 35 стр. (на английском языке).

**Абстракт** — Обзор посвящен работам по взаимодействию одноименно заряженных частиц между собой в импульсных полях одной и двух световых волн.

Обзор состоит из двух глав.

В первой главе рассмотрено взаимодействие одноименно заряженных частиц в импульсном поле одной линейно поляризованной световой волны, распространяющейся вдоль оси  $Z$ . Исследована средняя эффективная сила взаимодействия двух нерелятивистских электронов, движущихся навстречу друг другу вдоль оси  $X$  и перпендикулярно распространению световой волны. Найден эффект притяжения электронов после достижения максимума интенсивностей при  $\tau = 0$  в сильных лазерных полях, когда скорость осцилляций электронов намного больше их относительной скорости. Установлено, что внешнее лазерное поле не позволяет электронам сближаться на кулоновские расстояния, а после сближения до некоторого минимально возможного расстояния, вследствие притяжения электронов в эффективном потенциале, частицы медленнее (по сравнению со взаимодействием без внешнего поля) удаляются друг от друга. Далее исследовано взаимодействие двух нерелятивистских ионов водорода, движущихся практически параллельно друг другу в плоскости распространения световой волны. Получен эффект притяжения ионов после достижения максимума интенсивностей при  $\tau = 0$  в средних лазерных полях, когда скорость осцилляций ионов одного порядка с величиной поперечной скорости относительного движения.

Во второй главе исследовано взаимодействие между одноименно заряженными частицами в импульсном поле двух встречных световых волн, распространяющихся вдоль оси  $Z$ . Исследована средняя эффективная сила взаимодействия двух нерелятивистских электронов, движущихся навстречу друг вдоль оси  $X$  и перпендикулярно распространению световых волн. Показано, что при одинаковых интенсивностях и частотах волн варьирование времен импульсов приводит к усилению притяжения электронов в поле двух волн по сравнению с полем одной волны.

Причем, если времена импульсов отличаются на порядок и более, имеет место удержание электронов около некоторого относительного расстояния в течение времени большего времени импульса.

Рассмотрено взаимодействие двух нерелятивистских ионов водорода, движущихся практически параллельно друг другу в направлении распространения световых волн. Показана возможность усиления притяжения ионов (по сравнению с полем одной волны) в пучке и удержание частиц на некотором относительном расстоянии достаточно длительное время за счет варьирования интенсивностей и времен импульсов при одинаковых частотах волн.

Также изучено взаимодействие двух нерелятивистских тяжелых ядер (уран 235), движущихся навстречу друг другу перпендикулярно распространению световых волн. Обнаружен эффект существенной задержки разлета ядер после их максимального сближения, при условии, что начальная относительная скорость и скорости осцилляций ядер в первой и второй волнах одного порядка величины. При этом время задержки может на порядок величины превышать время разлета без внешнего поля.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Когерентные и резонансные квантовоэлектродинамические явления в сильных лазерных полях”.

## КОНТАКТ ДВУХ УПРУГИХ КЛИНЬЕВ С УЧЕТОМ ТРЕНИЯ И СЦЕПЛЕНИЯ

**В. И. Острик** — Институт прикладной физики НАН Украины;  
**А. Ф. Улитко** — Киевский национальный университет им. Т. Шевченко

Опубликовано в книге: Упругость и неупругость. Материалы Международного научного симпозиума по проблемам механики деформируемых тел, посвященному 100-летию со дня рождения А. А. Ильюшина (Москва, 20–21 января 2011 года). – М.: Изд-во Московского ун-та, 2011. – 488 с. – С. 427-435.

Два упругих клина с углами полураствора  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  ( $G_1, G_2, m^{(1)}, m^{(2)}$  – их модули сдвига и числа Пуассона), оси которых совпадают, касаются друг друга своими вершинами. Клинья сжимаются под действием напряжений, приложенных на бесконечности, с главным вектором  $P$  для каждого клина. В процессе нагружения клинья деформируются и их берега входят в контакт вблизи их общей вершины. Длина области контакта заранее неизвестна и определяется в ходе решения задачи из условия равновесия.

Считаем, что область контакта  $0 \leq r \leq l$  на каждой грани обоих клиньев разделяется в неизвестном отношении на зону сцепления  $0 \leq r \leq l_1$  и зону проскальзывания  $l_1 < r \leq l$ . Также полагаем, что в зоне проскальзывания касательные напряжения связаны с нормальными законом трения Амонтона – Кулона, а в зоне сцепления накапливается так называемая "защемленная деформация", распределенная по линейному закону.

Соответствующая краевая задача теории упругости для двух клиньев с использованием интегрального преобразования Меллина сводится к системе интегральных уравнений с разностными ядрами относительно функции нормальных напряжений в зоне проскальзывания и функций нормальных и касательных напряжений в зоне сцепления. Система интегральных уравнений методом Винера – Хопфа приводится к бесконечной системе алгебраических уравнений типа Пуанкаре – Коха с экспоненциально затухающими коэффициентами. Ее решение находится в рядах по степеням малого параметра  $\lambda = (l_1/l)^{\pi/(2\alpha_1+2\alpha_2)}$  ( $0 < \lambda < 1$ ). Для определения коэффициентов разложения методом неопределенных коэффициентов получены рекуррентные соотношения. Для определения параметра  $\lambda$ , а по нему и размера зоны сцепления  $l_1$  служит условие ограниченности напряжений в точке перехода из зоны сцепления в зону проскальзывания.

Получены аналитические зависимости для распределения нормальных и касательных напряже-

ний в области контакта в виде рядов по корням трансцендентных уравнений, коэффициенты которых выражаются через решение бесконечной системы алгебраических уравнений. Контактные напряжения ограничены в случае  $\alpha_1 \leq \pi/2$ ,  $\alpha_2 \leq \pi/2$  и неограничены в вершине клиньев, когда один из углов  $\alpha_1, \alpha_2$  превышает  $\pi/2$ .

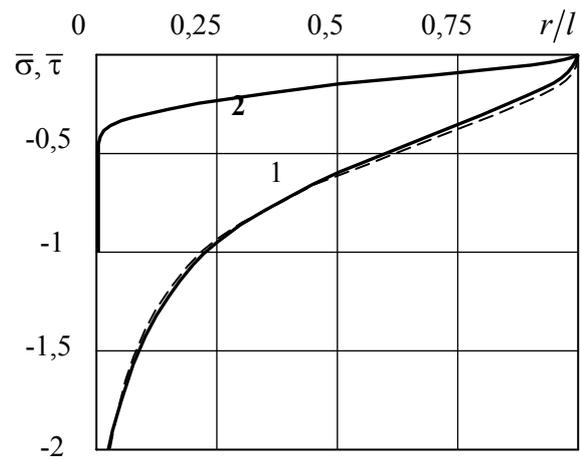


Рис. 1

Распределение контактных напряжений в случае взаимодействия упругого клина ( $\alpha_1 = 4\pi/9$ ,  $m^{(1)} = 10/3$ ) с абсолютно жестким ( $G_2/G_1 = \infty$ ) показано на рис. 1. Сплошные кривые 1, 2 соответствуют безразмерным (отнесенным к множителю  $2G_1\varepsilon$ ) нормальным  $\bar{\sigma}$  и касательным  $\bar{\tau}$  напряжениям при контакте клиньев с трением (коэффициент трения  $\mu_0 = 0,25$ ) и частичным сцеплением ( $l_1/l = 0,2644$ ,  $l = 0,672P/(2G_1\varepsilon)$ ). Пунктирная кривая 1 отвечает нормальным контактным напряжениям при гладком контакте упругого и жесткого клиньев ( $\mu_0 = 0$ ,  $l = 0,697P/(2G_1\varepsilon)$ ). Видно, что трение имеет незначительное влияние на распределение нормальных контактных напряжений. Лишь в малой окрестности вершины клина неограниченные нормальные контактные напряжения при учете трения переходят в конечные, хотя имеют в вершине клина  $r/l = 0$  большое пиковое значение  $\bar{\sigma} = -10,71$ . При наличии трения также возникают касательные контактные напряжения со значительным градиентом в вершине упругого клина ( $\bar{\tau} = -1$  при  $r/l = 0$ ).

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы "Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия".

## КОНТАКТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КРУГОВОГО ШТАМПА С УПРУГИМ ПОЛУПРОСТРАНСТВОМ ПРИ НАЛИЧИИ ТРЕНИЯ И СЦЕПЛЕНИЯ

В. И. Острик — Институт прикладной физики НАН Украины

Опубликовано в журнале: Теоретическая и прикладная механика. – 2011. – Вып. 2 (48). – С. 22-28.

При контактном взаимодействии упругих тел с учетом сил трения область контакта, как правило, разделяется на зоны сцепления и проскальзывания [1]. Впервые контакт со сцеплением и проскальзыванием рассмотрен Л. А. Галиным [2] в задаче о вдавливании штампа с прямолинейным основанием в упругую полуплоскость. Ниже рассматривается осесимметричный аналог задачи Галина – контакт со сцеплением и проскальзыванием кругового штампа с плоским основанием и упругого полупространства.

Пусть круговой штамп с плоским основанием ( $0 \leq r \leq R$ ,  $0 \leq \vartheta < 2\pi$ ) радиуса  $R$  вдавливается нормальной силой  $P$  в упругое полупространство  $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \vartheta < 2\pi$ ,  $0 \leq \zeta < \infty$ . С учетом сил трения область контакта разделяется на круговую зону сцепления  $0 \leq r \leq R_1$  внутри основания штампа ( $R_1 < R$ ), радиус  $R_1$  которой заранее неизвестен, и кольцевую зону проскальзывания  $R_1 < r \leq R$  на крае основания штампа. Считаем, что в зоне проскальзывания выполняется закон трения Амонтона с проскальзыванием граничных точек полупространства к середине штампа.

В условиях осесимметричной деформации имеем смешанную задачу теории упругости для полупространства  $\zeta \geq 0$  с граничными условиями

$$\begin{aligned} u_\zeta|_{\zeta=0} &= \delta \quad (0 \leq r \leq R), \quad u_r|_{\zeta=0} = 0 \quad (0 \leq r \leq R_1), \\ \tau_{r\zeta}|_{\zeta=0} &= \mu_0 \sigma_\zeta|_{\zeta=0} \quad (R_1 < r < R), \\ \sigma_\zeta|_{\zeta=0} &= 0, \quad \tau_{r\zeta}|_{\zeta=0} = 0 \quad (R < r < \infty), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mu_0$  – коэффициент трения,  $\delta$  – осадка штампа. Для определения осадки служит условие равновесия

$$2\pi \int_0^R \sigma_\zeta|_{\zeta=0} r dr = -P. \quad (2)$$

С помощью интегрального преобразования Меллина краевая задача (1), (2) сведена к системе интегральных уравнений с разностными ядрами, которая обобщенным методом Винера – Хопфа [3, 4] приведена к бесконечной системе алгебраических уравнений с экспоненциально затухающими коэффициентами. Ее решение находится в рядах по степеням малого параметра  $\lambda = (R_1/R)^2$

( $0 < \lambda < 1$ ). Радиус зоны сцепления  $R_1$  находится из условия ограниченности напряжений на линии раздела между зонами сцепления и проскальзывания.

Контактные напряжения и осадка штампа выражены в виде степенных рядов через решение бесконечной системы алгебраических уравнений.

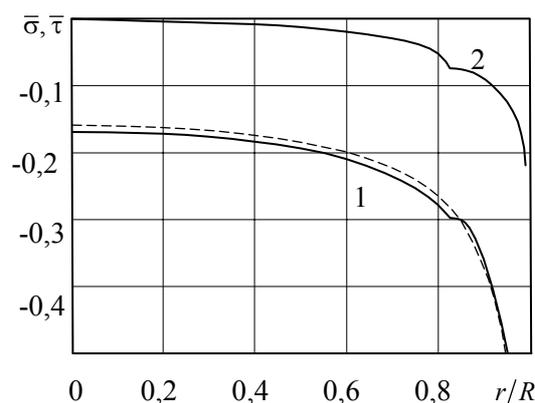


Рис. 1

На рис. 1 приведены результаты вычислений контактных напряжений в случае числа Пуассона  $m = 10/3$  и коэффициента трения  $\mu_0 = 0,25$ . Кривая 1 показывает распределение безразмерных нормальных  $\bar{\sigma} = (R^2/P)\sigma_\zeta|_{\zeta=0}$ , кривая 2 – касательных  $\bar{\tau} = (R^2/P)\tau_{r\zeta}|_{\zeta=0}$  напряжений. На линии  $r = R_1 = 0,8239R$  перехода из зоны сцепления в зону проскальзывания графики напряжений имеют характерные изломы. Для случая гладкого контакта ( $\mu_0 = 0$ ) распределение величины  $\bar{\sigma} = 1/(2\pi\sqrt{1-(r/R)^2})$  изображено пунктиром [1].

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

### Список ссылок

1. Джонсон К. Механика контактного взаимодействия. – М.: Мир, 1989. – 510 с.
2. Галин Л. А. Вдавливание штампа при наличии трения и сцепления // Прикл. математика и механика. – 1945. – 9, вып. 5. – С. 413-424.
3. Нобл Б. Метод Винера–Хопфа. – М.: Иностран. лит., 1962. – 280 с.
4. Антипов Ю. А. Точное решение задачи о вдавливании кольцевого штампа в полупространство // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1987. – № 7. – С. 29-33.

## ВДАВЛИВАНИЕ ШТАМПА В УПРУГУЮ ПОЛОСУ ПРИ НАЛИЧИИ ТРЕНИЯ И СЦЕПЛЕНИЯ

В. И. Острик — Институт прикладной физики НАН Украины

Опубликовано в журнале: Известия РАН. Механика твердого тела. — 2011. — № 4. — С. 181-193.

Рассматривается аналог задачи Галина для полосы — контакт со сцеплением и проскальзыванием штампа с прямолинейным основанием и упругой полосы, одна грань которой закреплена.

Пусть штамп ( $0 \leq x \leq l$ ) с прямолинейным основанием ширины  $l$  под действием нормальной силы  $P$ , приложенной к середине штампа ( $x = l/2$ ), вдавливается в верхнюю грань  $y = h$  упругой полосы  $-\infty < x < \infty$ ,  $-h \leq y \leq h$  с жестко закрепленной нижней гранью  $y = -h$ . При этом основание штампа остается параллельным нижней грани полосы, так что осадка штампа  $\delta$  постоянна, но заранее неизвестна. С учетом сил трения область контакта  $0 \leq x \leq l$ ,  $y = h$  так же, как и в задаче Галина, разделяется на зону сцепления  $l_1 \leq x \leq l - l_1$  внутри основания штампа и две зоны проскальзывания  $0 < x < l_1$ ,  $l - l_1 < x < l$  неизвестного размера  $l_1$  на ее краях. Считаем, что в зонах проскальзывания выполняется закон трения Амонтона с проскальзыванием граничных точек упругой полосы под штампом к середине области контакта.

В условиях плоской деформации имеем смешанную задачу теории упругости для полосы  $-\infty < x < \infty$ ,  $-h \leq y \leq h$  со следующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} u_y|_{y=h} &= -\delta \quad (0 \leq x \leq l), \\ \tau_{yx}|_{y=h} &= \text{sign}(l/2 - x) \cdot \mu_0 \sigma_y|_{y=h} \\ &\quad (0 < x < l_1, \quad l - l_1 < x < l), \\ u_x|_{y=h} &= 0 \quad (l_1 \leq x \leq l - l_1), \\ \sigma_y|_{y=h} &= 0, \quad \tau_{yx}|_{y=h} = 0 \\ &\quad (-\infty < x < 0, \quad l < x < \infty), \\ u_x|_{y=-h} &= 0, \quad u_y|_{y=-h} = 0 \\ &\quad (-\infty < x < \infty), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mu_0$  — коэффициент трения. Для определения осадки  $\delta$  служит условие равновесия штампа

$$\int_0^l \sigma_y|_{y=h} dx = -P. \quad (2)$$

С помощью интегрального преобразования Фурье краевая задача (1), (2) сведена к системе интегральных уравнений с разностными ядрами,

которая обобщенным методом Винера — Хопфа приведена к регулярной бесконечной системе алгебраических уравнений типа Пуанкаре — Коха с экспоненциально затухающими коэффициентами. Ее решение найдено методом редукции. Условие ограниченности напряжений в точках  $x = l$ ,  $l - l_1$ ,  $y = h$  служит для определения размера зоны проскальзывания  $l_1$ . Контактные напряжения и осадка штампа выражены в виде степенных рядов через решение бесконечной системы алгебраических уравнений.

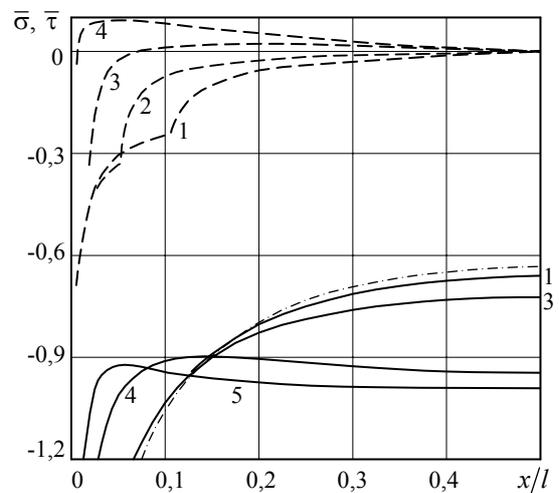


Рис. 1

Вычисления проводились при значениях коэффициента Пуассона  $\nu = 1/3$  и коэффициента трения  $\mu_0 = 1/4$ . На рис. 1 показано распределение безразмерных нормальных  $\bar{\sigma} = (l/P)\sigma_y|_{y=h}$  (сплошные кривые) и касательных  $\bar{\tau} = (l/P)\tau_{xy}|_{y=h}$  (пунктирные линии) контактных напряжений. Кривые 1-5 соответствуют значениям относительной ширины штампа  $l/(2h) = 0,25; 0,5; 1; 4; 10$ . При этом безразмерная осадка  $\bar{\delta} = \delta Gl/(Ph)$  соответственно равна 0,233; 0,327; 0,410; 0,479; 0,491. Штрих-пунктирная линия отвечает распределению величины  $\bar{\sigma}$  при  $l/(2h) = 0,25$ ,  $\mu_0 = 0$ . Для штампов больших размеров ( $l/(2h) = 1; 4; 10$ ) распределение нормальных контактных напряжений (сплошные кривые 3, 4, 5) практически не отличается от случая гладкого контакта.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

## КОВЗНИЙ КОНТАКТ ШТАМПА З ПРУЖНИМ КЛИНОМ

В. І. Острик, О. М. Щокотова — Інститут прикладної фізики НАН України

Опубліковано в журналі: Фізико-хімічна механіка матеріалів. – 2011. – Вип. 4. – С. 82-91

Розглядається контактна взаємодія штампа з прямолінійною основою та пружного клина  $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \vartheta \leq \alpha$  в умовах плоскої деформації. Нижня грань  $\vartheta = 0$  клина жорстко закріплена. Під дією нормальної  $P$  та дотичної  $\mu_0 P$  сил ( $|\mu_0|$  – коефіцієнт тертя між клином та основою штампа; при  $\mu_0 > 0$  штамп рухається у напрямку від вершини клина, при  $\mu_0 < 0$  – до вершини, якщо  $\mu_0 = 0$ , маємо гладкий контакт), лінії дії яких проходять через середину основи штампа, а також моменту  $M$  штамп втискується у внутрішню частину  $l_1 \leq r \leq l$  верхньої грані  $\vartheta = \alpha$  клина. Тут є повне проковзування вздовж усієї ділянки контакту  $l_1 \leq r \leq l$ , на якій нормальні та дотичні напруження зв'язані законом тертя Амонтона (Кулона) [1]. Внаслідок деформації клина основа штампа повертається на деякий кут  $\varepsilon$  та зміщується на відстань  $b$ .

Мішані крайові умови на гранях клина:

$$\begin{aligned} u_r|_{\vartheta=\alpha} &= b - \varepsilon r, \quad \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} = -\mu_0 \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} \quad (l_1 \leq r \leq l), \\ \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= 0, \quad \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} = 0 \quad (0 \leq r < l_1, l < r < \infty), \\ u_r|_{\vartheta=0} &= 0, \quad u_{\vartheta}|_{\vartheta=0} = 0 \quad (0 \leq r < \infty). \end{aligned} \quad (1)$$

Невідомі зміщення  $b$  та кут повороту штампа  $\varepsilon$  визначимо з умов рівноваги штампа:

$$\int_{l_1}^l \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} dr = -P, \quad \int_{l_1}^l r \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} dr = M - \frac{l+l_1}{2} P. \quad (2)$$

Із застосуванням інтегрального перетворення Мелліна задача (1), (2) зведена до інтегрального рівняння з різницеvim ядром, розв'язок якого знаходимо, звівши його до нескінченної системи алгебричних рівнянь за відомим підходом [2]. Її розв'язок шукаємо в рядах за степенями малого параметру  $\lambda = e^{-\pi\alpha/(2\alpha)} = (l_1/l)^{\pi/(2\alpha)}$  ( $0 < \lambda < 1$ ). Для коефіцієнтів рядів отримано рекурентні співвідношення.

Контактні напруження та переміщення точок незакріпленої грані клина виражаються через розв'язок нескінченної системи алгебричних рівнянь у вигляді степеневих рядів за коренями трансцендентних рівнянь.

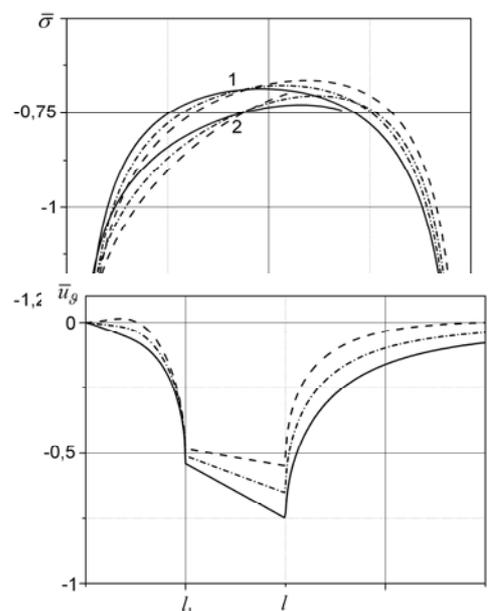
На рис. 1, 2 подано результати обчислень нормальних контактних напружень та колових переміщень точок грані  $\vartheta = \alpha$  пружного клина з кутом розхилу  $\alpha = \pi/4$  за відсутності моменту  $M = 0$  та при значенні числа Пуассона  $m = 10/3$ .

Суцільні криві відповідають значенню коефіцієнту тертя  $\mu_0 = 0,5$  (рух штампа від вершини); штрихові –  $\mu_0 = -0,5$  (рух штампа до вершини); штрихпунктирні –  $\mu_0 = 0$  (гладкий контакт).

Розподіл безрозмірних нормальних контактних напружень  $\bar{\sigma} = (l-l_1)P^{-1} \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha}$  наведено на рис. 1. Криві 1 відповідають значенню відношення відстаней від країв штампа до вершини клина  $l/l_1 = 2$ ; криві 2 –  $l/l_1 = 6$ . Зі зростанням відношення  $l/l_1$ , тобто зі зменшенням відстані від штампа до вершини клина, так само, як і під час руху штампа до вершини клина ( $\mu_0 < 0$ ), розподіл контактних напружень стає асиметричнішим.

На рис. 2 зображені безрозмірні колові переміщення  $\bar{u}_{\vartheta} = (2G/P)u_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha}$ , які характеризують форму деформованої грані клина у випадку  $l/l_1 = 2$  та ілюструють вплив тертя на величину просідання і повороту штампа.

Рис. 1, 2



Робота виконана в рамках держбюджетної теми “Статистична теорія утворення і еволюції ієрархічних дефектних структур в системах віддалених від рівноваги”.

### Список посилань

1. Джонсон К. Механіка контактного взаємодія. – М.: Мир, 1989. – 510 с.
2. Антипов Ю. А. Точное решение задачи о вдавливаннии кольцевого штампа в полупространство // Докл. АН УССР. – 1987. – № 7. – С. 29–33.

## КОНТАКТ ШТАМПА ТА ПРУЖНОГО КЛИНА З УРАХУВАННЯМ ТЕРТЯ ТА ЗЧЕПЛЕННЯ

В. І. Острик, О. М. Щокотова — Інститут прикладної фізики НАН України

Опубліковано в журналі: *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*. — 2011. — Вип. 13. — С. 121-131.

Розглядається контактна взаємодія штампа з прямолінійною основою та пружного клина  $0 \leq r < \infty$ ,  $0 \leq \vartheta \leq \alpha$  в умовах плоскої деформації. Нижню грань  $\vartheta = 0$  клина жорстко закріплено, а у верхню грань  $\vartheta = \alpha$  на відрізку  $0 \leq r \leq l$  вдавлюється штамп під дією нормальної сили  $P$ , прикладеної до правого краю штампа ( $r = l$ ,  $l$  — розмір основи штампа). Лівий край штампа ( $r = 0$ ) нерухомий і опирається на закріплену грань клина у його вершині. Щільне прилягання основи штампа до грані клина забезпечується прикладеним до штампа моментом  $M$ . Інша частина ( $r > l$ ) грані  $\vartheta = \alpha$  клина вільна від навантажень. Внаслідок деформації пружного клина основа штампа повертається на деякий кут  $\varepsilon$ . За наявності тертя область контакту  $0 \leq r \leq l$ ,  $\vartheta = \alpha$  поділяється на зону зчеплення  $0 \leq r \leq l_1$  і зону проковзування  $l_1 < r \leq l$ , в якій нормальні та дотичні напруження пов'язані законом тертя Амонтона (Кулона) [1]. Вважаємо, що в зоні проковзування граничні точки пружного клина зміщуються у напрямку до його вершини.

Змішані крайові умови на гранях клина запишемо у такому вигляді ( $\mu_0$  — коефіцієнт тертя)

$$\begin{aligned} u_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= -\varepsilon r \quad (0 \leq r \leq l), \\ u_r|_{\vartheta=\alpha} &= 0 \quad (0 \leq r \leq l_1), \\ \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= -\mu_0 \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} \quad (l_1 < r < l), \\ \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} &= 0, \quad \tau_{r\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} = 0 \quad (l < r < \infty), \\ u_{\vartheta}|_{\vartheta=0} &= 0, \quad u_r|_{\vartheta=0} = 0 \quad (0 \leq r < \infty). \end{aligned} \quad (1)$$

Також повинні виконуватись умови рівноваги штампа

$$\int_0^l \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} dr = -P, \quad \int_0^l r \sigma_{\vartheta}|_{\vartheta=\alpha} dr = -Pl + M, \quad (2)$$

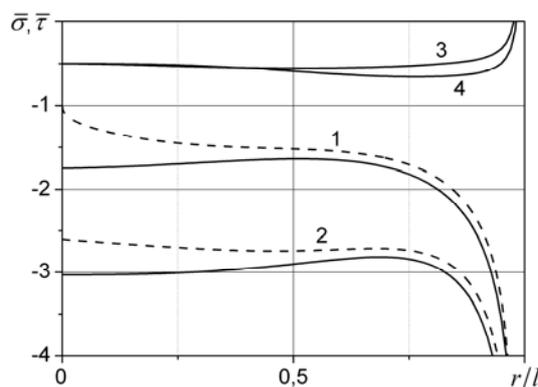
з яких визначаються кут повороту штампа та прикладений до нього момент.

Із застосуванням інтегрального перетворення Мелліна задача (1), (2) зведена до системи інтегральних рівнянь з різницевиими ядрами, яку з використанням процедур методу Вінера – Гопфа [2] перетворено до нескінченної системи алгебричних рівнянь із експоненціально спадаючими коефіцієнтами. Відносний розмір

зони зчеплення  $l_1/l$  знаходимо з умови обмеженості контактних напружень у точці переходу із зони зчеплення у зону проковзування.

Через розв'язок нескінченної системи алгебричних рівнянь отримано нормальні і дотичні напруження в області контакту, а також переміщення точок незакріпленої грані клина у вигляді степеневих рядів за коренями трансцендентних рівнянь.

На рис. 1 криві 1 і 3 відповідають розподілу безрозмірних нормальних  $\bar{\sigma} = \sigma_{\vartheta}/(2G\varepsilon)|_{\vartheta=\alpha}$  та дотичних  $\bar{\tau} = \tau_{r\vartheta}/(2G\varepsilon)|_{\vartheta=\alpha}$  контактних напружень для значення кута розхилу клина  $\alpha = \pi/4$ , криві 2 і 4 — для  $\alpha = \pi/6$ . Суцільні криві відповідають фрикційному контакту ( $\mu_0 = 0,5$ ), штрихові — гладкому контакту ( $\mu_0 = 0$ ). Обчислення проводились у



випадку значення числа Пуассона  $m = 10/3$ .

Рис. 1

Наявність тертя та зчеплення дещо підвищує контактний тиск у зоні зчеплення і веде до появи дотичних контактних напружень, які змінюють знак поблизу правого краю зони зчеплення у точці  $r = l_1 - \delta$  ( $\delta/l = 0,018$  для  $\alpha = \pi/4$ ,  $\delta/l = 0,014$  для  $\alpha = \pi/6$ ). Тому майже уздовж усієї області контакту відбувається зсув примезових шарів пружного клина у напрямку від його вершини, та тільки у малій зоні проковзування граничні точки клина рухаються у напрямку до вершини клина.

Робота виконана в рамках держбюджетної теми “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

### Список посилань

1. Джонсон К. Механика контактного взаимодействия. — М.: Мир, 1989. — 510 с.
2. Нобл Б. Метод Винера–Хопфа. — М.: Иностран. лит., 1962. — 280 с.

## STRUCTURE FORMATION PROCESSES INDUCED BY THE ION SPUTTERING IN ANYSOTROPIC SYSTEM WITH ADDITIVE NOISE

V.O. Kharchenko — Institute of Applied Physics, NAS of Ukraine

Published in *Functional Materials*, 2011, V.18, №2, pp.156-164

**Abstract** — The processes of structure formation in an anisotropic system described by Kuramoto-Sivashinskiy equation with additive noise as a generalization of the Bradley-Harper model for the surface structures formation induced by ion sputtering processes are studied. The time stability of the periodic spatial structures in the linear regime is considered. For a nonlinear model the various surface structures formation is studied, the power law of the surface growth is established, the roughness index and correlation fractal dimension of the respective structures are determined.

### 1. The model

We have used a generalized Kuramoto-Sivashinskiy equation for modeling the structure formation processes including white gaussian noise.

### 2. Results

We have calculated phase diagrams varying penetration depths and incidence angle. It was found, that in considered anisotropic system seven types of different structures can be formed. Phase diagram, illustrating regions of different structures realization is shown in Fig.1.

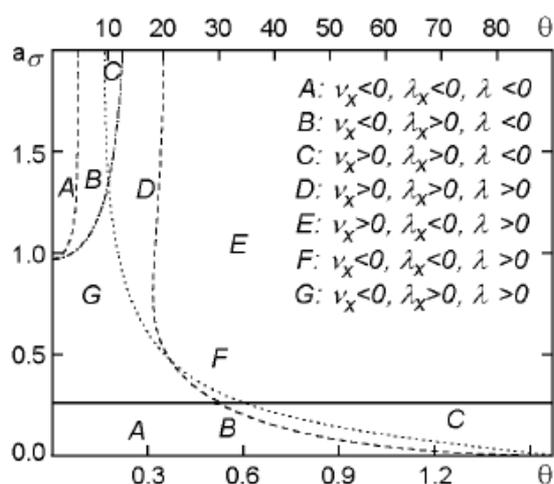


Fig.1. Phase diagram with seven redigion of different spatial structures realization

Typical structures, realized in each region in Fig.1 are shown in Fig.2.

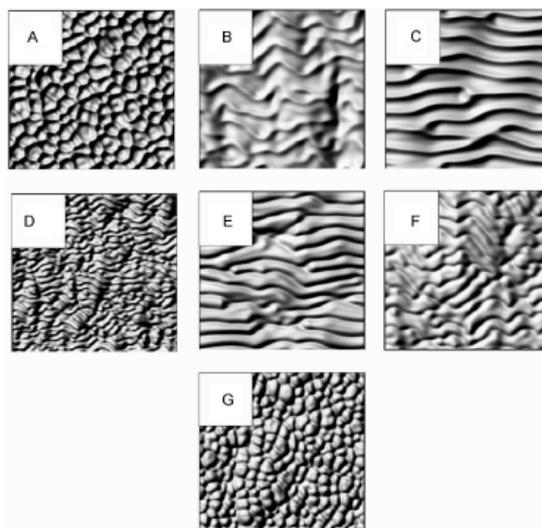


Fig.2. Typical structures in different regions in Fig.1

### 3. Conclusions

We have studied the pattern formation processes induced by the ion sputtering under stochastic condition of illumination in anisotropic system. The phase diagrams, illustrating formation of different patterns are obtained. The main properties of the pattern formation processes were studied with the help of interface width and correlation functions. We have shown that nano-dots and nano-holes patterns are stable in time. To make a detail analysis of the pattern formation we have examined the scaling behavior of main statistical characteristics of the system, reduced to the correlation functions and its Fourier transforms. We have computed the scaling exponents for all possible types of structures. It was shown, that the additive noise in anisotropic systems is able to delay the growth and coarsening processes and decrease the time interval where these processes are realized. We have calculated the fractal (correlation) dimension. It was shown, that all patterns have fractal structure.

Performed within state budget subject “Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium”.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ SI ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ИОНАМИ $A_R$

Д.О. Харченко, В.О. Харченко — Институт прикладной физики НАН Украины

Статья опубликована в журнале ВАНТ, 2011, Т.97, №2, с.16-21

**Аннотация** — Проведено численное моделирование изменения морфологии поверхности кремния при распылении ионами аргона. На основе совместного использования процедуры Монте-Карло и континуального подхода установлена диаграмма устойчивости поверхностных структур, имеющих наноразмерный масштаб. Выяснены скейлинговые характеристики длины волны структур при выборе их ориентации. Получены значения показателя роста, продольного и поперечного показателей шероховатости в областях диаграммы устойчивости, отвечающих различным типам структур.

### Основные результаты

В качестве модели для моделирования изменения морфологии поверхности кремния при распылении его ионами аргона использовалось анизотропное уравнение Курамото-Сивашин-ского. Значения глубин проникновения ионов аргона вглубь кремния в зависимости от энергии налетающего иона получены методом Монте-Карло.

Установлено, что количество структур, имеющих равноосную симметрию при фиксированных значениях энергии налетающих ионов и угла падения ионов на поверхность сперва со временем растет — стадия образования структур, а затем, на больших временах, остается постоянной величиной. Установлена зависимость среднего размера равноосных структур от энергии налетающих ионов при разных значениях углов падения (см. рис1).

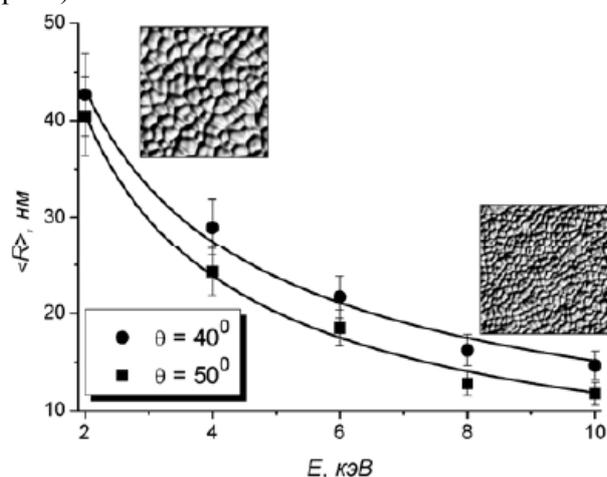


Рис. 1. Зависимость среднего размера поверхностных структур от энергии ионов в стационарном случае

### Выводы

Проанализирована кинетика формирования нано-размерных структур на поверхности кремния при облучении ионами аргона. Установлено, что в такой системе возможными являются поверхностные структуры, представляющие островки «дырок» и полосовые структуры. Выяснено, что с изменением угла распыления переориентация структур приводит к изменению скейлинговой характеристики зависимости длины волны от энергии ионов. При исследовании динамики образования островков установлено, что на временных масштабах зарождения реализуется степенной закон роста, на больших временах количество островков является постоянной величиной. Получены значения показателя роста, продольного и поперечного показателей шероховатости. Установлено, что соотношения между продольным и поперечным показателями шероховатости определяются соотношениями между соответствующими поверхностными натяжениями.

Работа выполнена в рамках госбюджетной темы “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

## MORPHOLOGY CHANGE OF THE SILICON SURFACE INDUCED BY $Ar^+$ ION BEAM SPUTTERING

V.O. Kharchenko, D.O. Kharchenko – Institute of Applied Physics, NAS of Ukraine

Published in *Cond.Mat.Phys.*, V.14, N2, P.23602(11)

**Abstract** — Two-level modeling for nanoscale pattern formation on silicon target by  $Ar^+$  ion sputtering is presented. Phase diagram illustrating possible nanosize surface patterns is discussed. Scaling characteristics for the structure wavelength dependence versus incoming ion energy are defined. Growth and roughness exponents in different domains of the phase diagram are obtained.

### Main results

Two-level modeling for nanoscale pattern formation on silicon target induced by  $Ar^+$  ion sputtering has been reported. We have used Monte Carlo simulations and continuum approach based on the Bradley-Harper theory. It was shown that for the described system dependencies of the averaged penetration depth of the incident ion and corresponding distribution widths of the deposited energy in directions parallel and perpendicular to the incoming beam versus ion energy are of the power-law form. Varying incoming ion energy and ion incidence angle we have defined sputtering yield with the help of the Monte Carlo modeling (Fig.1). Obtained results have been used in the modified Bradley-Harper theory in the framework of two-scale modeling scheme.

We have computed phase diagram for control parameters: incidence angle  $\theta$  and ion energy  $\varepsilon$ , that defines possible patterns on silicon target sputtered by  $Ar^+$  ions (see Fig.2). It was shown that at small incident angles nanohole patterns are

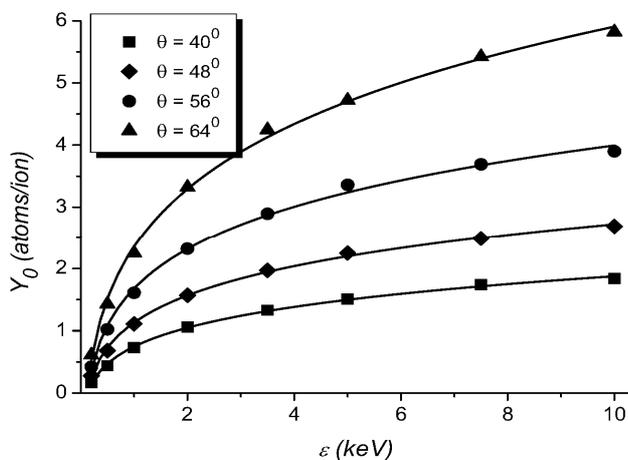


Fig.1. Sputtering yield for  $Ar^+$  in Si at fixed incidence angle

realized, whereas at large incidence angles patterns type of ripples are observed. Analyzing the

morphology change of silicon surface we have shown that during the system evolution a number of nanoholes/ripples becomes a constant, indicating stability of obtained structures in time.

We have found that there are deviations from the Bradley-Harper asymptotics for the wavelength dependence on the ion energy. Moreover when the

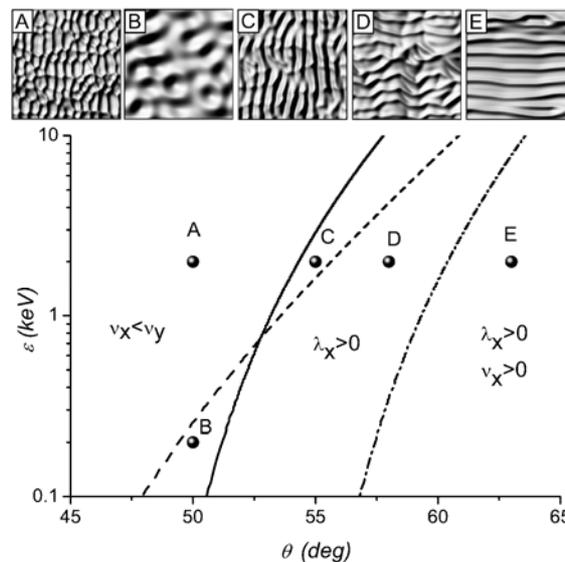


Fig.2. Phase diagram and typical surface patterns

orientation of patterns is changed a kink in such asymptotics is realized. The exponent of such power-law asymptotics depends on the angle of incidence. At fixed values for incidence angle one has two scaling exponents related to small and large values for ion energy according to a change in the orientation of structures.

Studying scaling characteristics of the height-height correlation function the growth exponent together with longitudinal and transverse roughness exponents are obtained for different values of incidence angle at fixed ion energy. It was shown that relations between roughness exponents are defined through relations between corresponding effective surface tensions.

Obtained results in two-scale modeling scheme are in good correspondence with known theoretical and experimental data for sputtering of silicon target by  $Ar^+$  ions in considered values interval for incidence angle of ions, incoming ion energy, temperature and ion flux.

Performed within state budget subject “Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium”.

## РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГПУ СПЛАВОВ Zr – Nb И Zr + ВАКАНСИИ

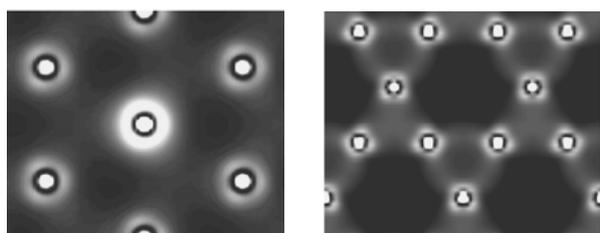
В.О. Харченко — Институт прикладной физики НАН Украины

Статья опубликована в журнале *Металлофизика и новейшие технологии*, 2011, Т.33, № 5, сс.577-589

**Абстракт** — Проведено первопринципное моделирование электронной структуры ГПУ сплавов *Zr – Nb*, и *Zr* содержащего вакансии при нулевой температуре, используя теорию функционала плотности, метод линейаризованных присоединенных плоских волн и приближение обобщенного градиента. Исследованы структурные и энергетические свойства двух упорядоченных структур: *Zr – 12.5% Nb* и *Zr + 12.5% вакансий*, образованных путем внедрения атома ниобия, как атома замещения, в кристалл циркония и учета вакансии, соответственно, в положении (0,0,0) в плоскости *A*. Определены оптимальные значения параметров решетки указанных структур. Выявлено влияние ниобия, как атома замещения, в решетке циркония, и вакансий на характер изменения значений полной энергии кристалла и энергии Ферми, плотности состояний, энергетического спектра и рентгеновских спектров поглощения/излучения.

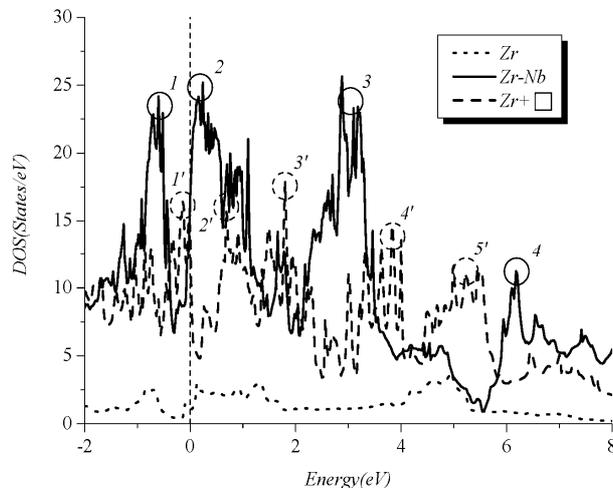
### 1. Результаты

На рисунке 1 представлены электронные плотности структуры *Zr – Nb* в плоскости, содержащей атомы ниобия; и элементарной структуры *Zr + κ вакансии* в плоскости, содержащей вакансии.



**Рис.1.** Электронная плотность структуры *Zr – Nb* в плоскости, содержащей атомы ниобия; элементарной структуры *Zr + κ вакансии* в плоскости, содержащей вакансии.

Зависимости полной плотности состояний для трех структур: чистого циркония, *Zr – Nb*, и *Zr + κ вакансии*, представлены на рис.2.



**Рис.2.** Зависимость полной плотности состояний от энергии, отсчитанной от энергии Ферми.

### 2. Выводы

Проведенные расчеты показали, что в сплаве *Zr – Nb*, содержащего вакансии, с большей вероятностью будут образовываться элементарные структуры *Zr – 12.5% Nb* нежели элементарные структуры *Zr + 12.5% вакансий*. При этом, внедрение атома ниобия, как атома замещения, в кристалл циркония вытягивает ее в направлении *c* увеличивая структурное соотношение *c/a*. Учет вакансий в кристалле циркония симметрично сжимает элементарную ячейку. Установлено, что амплитуда основных пиков на зависимости полной плотности состояний у элементарной структуры *Zr – 12.5% Nb* больше нежели у *Zr + 12.5% вакансий*. Показано, что внедрение ниобия, как атома замещения, в кристалл циркония увеличивает амплитуду эмиссионного рентгеновского спектра, не меняя положения пика зависимости, и уменьшает значение энергии поглощаемых рентгеновских фотонов. Установлено, что энергия Ферми для элементарной структуры *Zr – 12.5% Nb* ниже нежели для *Zr + 12.5% вакансий*.

Работа выполнена в рамках научно-исследовательской работы “Использование и адаптация программных кодов по стандартам грид-технологий для мультимасштабного моделирования микроструктурных преобразований у материалах реакторной техники”.

## PHASE-FIELD MODELING OF EPITAXIAL GROWTH IN STOCHASTIC SYSTEMS WITH INTERACTING ADSORBATE

Vasyl O. Kharchenko, Dmitrii O. Kharchenko, Irina O. Lysenko – Institute of Applied Physics, NAS of Ukraine

Published in: *Physica Scripta*, V.83, P.045802(9) (2011)

**Abstract** — We study epitaxial growth of pyramidal patterns in stochastic systems with interacting adsorbates within the framework of phase field approach based on the Burton-Cabrera-Frank model. Assuming that the desorption rate is defined by the strong local bond we introduce and additional flux opposite to the diffusion one. Considering statistical criteria of the pattern formation it was shown that the system dynamics is governed by the interaction strength of adatoms and the noise intensity of the combined total flux fluctuations. We have shown that the noise action can crucially change processes of pyramidal pattern formation. Scaling behaviour of the height-height correlation function is discussed.

### Main results

In the framework of the phase field approach of the epitaxial growth of crystals based on the Burton-Cabrera-Frank model we derive the stochastic model by introducing fluctuations of the total atomic flux composed by ordinary diffusion flux and the flux related to interaction of adatoms.

$$\partial_t x = F - xe^{-\varepsilon x} + \nabla \cdot D_{ef}(x) \nabla x - \frac{\Sigma}{2} \nabla \cdot \left( \nabla \frac{dD_{ef}(x)}{dx} \right) + \nabla \cdot \sqrt{D_{ef}(x)} \xi(r, t) - \frac{1}{2} \partial_t \phi,$$

$$\partial_t \phi = \varpi \Delta \phi + \sin(\pi(\phi - \phi_s)) + \lambda x (1 + \cos(\pi(\phi - \phi_s))),$$

where  $x$  is the concentration field of adatoms,  $D_{ef}(x) = D(1 - \varepsilon x(1 - x))$ ,  $D$  is the diffusion coefficient of adatoms, the dimensionless interaction strength of adatoms is  $\varepsilon = u/T$ ,  $T$  is the temperature;  $\Sigma$  is intensity of fluctuations  $\langle \xi(r, t) \xi(r', t') \rangle = 2\Sigma \delta(r - r') \delta(t - t')$ ,  $\langle \xi \rangle = 0$ ;  $\phi$  is the height field,  $\varpi$  is the terrace width,  $\phi_s$  is the initial height of the surface,  $\lambda$  is the interaction parameter.

The proposed model is used to study pyramidal patterns growth on the surface (see Fig.1). It was shown that for such kind of structures the height probability density function has several peaks related to number of terraces. Studying the system behavior we have used three statistical criteria related to interface width, skewness, and kurtosis. It was shown that the system dynamics depends crucially on the interaction strength of adatoms and the noise intensity of the total flux fluctuations. It was shown that at large interaction strength  $\varepsilon$  of the adsorbate

pyramidal patterns are observable, whereas at small  $\varepsilon$  there are no well pronounced patterns due to large possibility of adatoms to evaporate from the condensate. The noise action results in symmetrical distribution of the height with respect to its average (the height distribution becomes Gaussian).

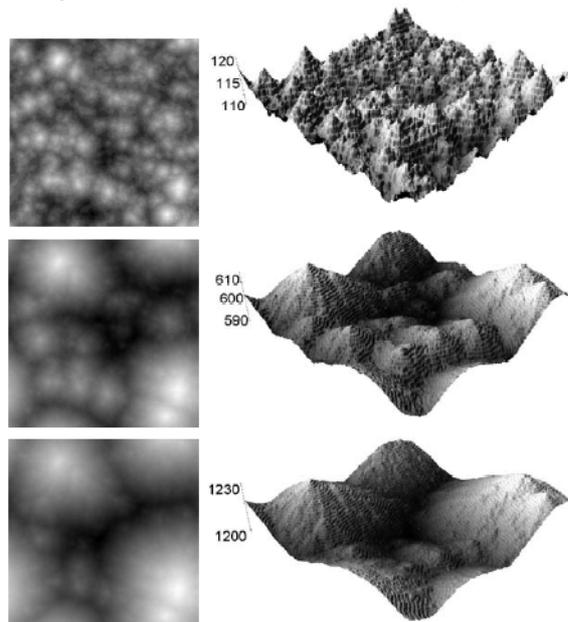


Fig.1. 2d and 3d snapshots of the order parameter field  $\phi$  at  $t=20, 100, 200$  (from top to bottom) at  $\varepsilon = 4.1$

Studying pattern formation processes we have found that there are two essential parameters (interaction strength  $\varepsilon$  of adatoms and the noise intensity  $\Sigma$  that govern the system behavior at non-zero deposition flux  $F$ ). At large values for  $\varepsilon$  the system goes to the saturation regime, the large noise intensity delays growth processes. Considering the two-point correlation function it was shown that the noise intensity crucially decreases the lateral correlation length at large  $\varepsilon$ .

Considering the scaling behavior of the height-height correlation function we have shown that there are set of scaling exponents governing universal behavior of correlation function versus space and time. In other words a more complicated form of the height-height correlation function than the simplest power-law approximation is realized.

Performed within state budget subject “Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium”.

## ПРОЦЕССЫ УПОРЯДОЧЕНИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

Д.О.Харченко, В.О. Харченко — Институт прикладной физики НАН Украины;  
А.В. Дворниченко — Сумської державний університет МОН України

**Монография: К.: Наукова думка, 2011. 263с.**

**Аннотация** – Монография посвящена проблемам самоорганизации нелинейных динамических систем, находящихся при интенсивном внешнем воздействии детерминированного и флуктуационного характера. Исследованы процессы формирования временных диссипативных структур, переход к хаосу в многокомпонентных системах и его контроль, проведен фрактальный анализ странного аттрактора. Отдельное место занимает исследование процессов структурообразования и неравновесных фазовых переходов в распределенных стохастических системах. Приведены методы описания и анализа временных диссипативных структур и хаотического режима, а также методы исследования стохастических систем. Рассмотренные задачи решены аналитически и численно.

Монография посвящена исследованию самоорганизующихся систем, которые обнаруживают поведение, присущее фазовым переходам. Работа содержит семь глав, построенных таким образом, чтобы в рамках единых синергетических представлений развить картину самоорганизации многокомпонентных детерминированных и стохастических систем, подверженных действию внешних и внутренних шумов. Такая картина основана на статистическом анализе, с помощью которого показано изменение наиболее вероятных и средних значений стохастических переменных. Анализ процесса самоорганизации основывается на рассмотрении временных зависимостей параметра порядка, сопряженного ему поля и управляющего параметра, самосогласованное поведение которых позволяет всесторонне исследовать процесс упорядочения сложной динамической системы: формирование временных структур в фазовом пространстве и переход к хаосу, превращение термодинамического типа и фазовые переходы, индуцированные шумами, наличие метастабильных фаз, реверсивный характер превращения, конструктивную роль коррелирующих шумов, условия формирования стационарных пространственных структур при неравновесных фазовых переходах и другие особенности процесса самоорганизации.

Первая глава содержит описание существующих представлений и методов исследования самоорганизующихся систем. Вторая глава посвящена исследованию нелинейных динамических систем, основанных на модели Лоренца–Хакена, которая самосогласованным образом описывает поведение трех коллективных переменных, сводящихся к параметру порядка, сопряженному полю и управляющему параметру, и широко применяется для описания синергетических переходов в оптически бистабильных системах, в системах дефектов в твердом теле, полимерных и социо-экономических системах. В третьей главе исследуется возможность и характер перехода в хаотический режим, а также детально изучаются свойства соответствующего хаотического аттрактора с использованием методов нахождения хаусдорфовой, корреляционной размерности и размерности, основанной на динамических показателях Ляпунова. В четвертой главе, посвященной описанию неравновесных фазовых переходов в системах с внутренним шумом, обсуждается принципиальный подход к построению моделей стохастических систем с релаксационными потоками. Одномодовое приближение в синергетической модели Лоренца–Хакена рассмотрено в главе 5, где введены флуктуации параметра порядка, сопряженного ему поля и управляющего параметра, являющиеся внешними, коррелированными по времени. В шестой главе исследуется картина фазового превращения стохастической системы, подверженной воздействию нескольких коррелирующих шумов, на основе разложения высших корреляторов по кумулянтам. В седьмой главе исследуются процессы формирования пространственных структур и реализация фазовых переходов в бинарных системах реакционно-диффузионного типа, основываясь на уравнении непрерывности для локального поля концентрации с зависимым от поля коэффициентом диффузии и внешней силой, задающей квазихимические процессы в системе.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

## СТРУКТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ СТОПІВ $Zr-x\%Nb$ : МОДЕЛЮВАННЯ З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

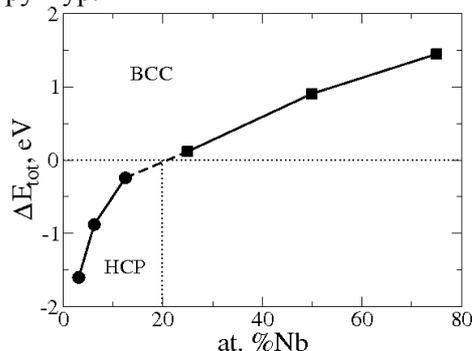
В.О.Харченко, Д.О.Харченко — Інститут прикладної фізики НАН України;  
В.О.Харченко — Інститут фізики, Аугсбургський університет

Стаття направлена до журналу *Журнал Фізичних досліджень*.

**Абстракт** — Проведено першопринципні дослідження структурних властивостей стопів  $Zr-Nb$  із довільними значеннями концентрації ніобію при нульовій температурі. Отримано оптимальні значення параметрів ґратки та, у випадку ГПУ структур, структурного співвідношення  $c/a$ . Встановлено критичне значення концентрації ніобію у цирконій-ніобієвих стопах, що відповідає структурному перетворенню ГПУ-ОЦК. Наведено густини станів для двох структур із концентрацією ніобія 12.5% та 25%, що характеризуються ГПУ та ОЦК структурами, відповідно.

### 1. Результати

Проведено процедуру з визначення енергетично найбільш вигідної структури для кожного із стопів  $Zr-xNb$ , що характеризується своїм значенням концентрації ніобію. Використовуючи оптимальні значення параметрів ґратки та, у випадку ГПУ структури,  $c/a$  обчислювалось значення повної енергії кристалу на елементарну комірку, що містить 32 атоми. Далі обчислювалась різниця повних енергій на елементарну комірку із 32-ох атомів ГПУ та ОЦК структур для кожного значення концентрації ніобію. Обчислена різниця повних енергій визначатиме тип енергетично найбільш вигідної структури. Критичне значення концентрації ніобію, що визначає структурне перетворення ГПУ-ОЦК, може бути визначене за умови реалізації енергетичної еквівалентності двох типів структур.



**Рис.1.** Залежність різниці повних енергій ГПУ та ОЦК структур на елементарну комірку з 32 атомів від концентрації ніобію у стопі  $Zr-xNb$ .

Отримані результати залежності різниці повних енергій ГПУ та ОЦК структур на

елементарну комірку з 32 атомів від концентрації ніобію у стопі  $Zr-xNb$  наведено на рис.1.

### 2. Висновки

Проведено теоретичні дослідження структурних властивостей стопів  $Zr-xNb$  із різними значеннями концентрації ніобію в рамках використання теорії функціоналу густини, методу приєднаних лінеаризованих плоских хвиль у наближенні узагальненого градієнту при нульовій температурі. Для кожного фіксованого значення концентрації ніобію у стопі розглянуто випадки ОЦК та ГПУ структур. Використовуючи оптимізаційну процедуру було отримано оптимальні значення параметрів ґратки та, у випадку ГПУ структур, структурного співвідношення  $c/a$ . Встановлено, що уведення атомів цирконію, як атомів заміщення, в ОЦК кристал ніобію збільшує оптимальне значення параметра ґратки. Отримана залежність параметра ґратки ОЦК кристалу від концентрації ніобію добре узгоджується із законом Вегарда та відомими експериментальними даними. При аналізі ГПУ стопів  $Zr-xNb$  при різних значеннях концентрації ніобію з'ясовано, що уведення атомів ніобію, як атомів заміщення, у ГПУ кристал цирконію призводить до зменшення значень параметра ґратки  $a$  та збільшення значень структурного співвідношення  $c/a$ . Залежність параметра ґратки  $a$  від концентрації ніобію у ГПУ стопі узгоджується із законом Вегарда лише при невеликих концентраціях ніобію, при яких отримані теоретичні розрахунки узгоджуються з відомими експериментальними даними. Аналізуючи значення повних енергій кристалів встановлено критичне значення концентрації ніобію 20% у стопі  $Zr-xNb$ , що відповідає структурному перетворенню ГПУ-ОЦК при нульовій температурі. Підвищення температури буде призводити до зменшення критичного значення внаслідок того, що термічні флуктуації атомів в околі вузлів ґратки стають великими, що призводить до руйнування більш складної ГПУ структури при зануренні більшої кількості атомів ніобію. Проведено розрахунки густини станів для двох структур із концентрацією ніобію 12.5% та 25%, що характеризуються ГПУ та ОЦК структурами, відповідно.

Робота виконана у рамках наукової роботи "Використання та адаптація програмних кодів за стандартом ґрід - технологій для

мультимасштабного моделювання  
мікроструктурних перетворень у матеріалах  
реакторної техніки”.

## FLUCTUATION EFFECTS ON PATTERN SELECTION IN THE HYPERBOLIC MODEL OF PHASE DECOMPOSITION

**D. Kharchenko, I. Lysenko – Institute of Applied Physics, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine;  
P. Galenko – Institut für Materialphysik im Weltraum, Institut für Festkörperphysik**

**Status of work: Monograph, be published in “Stochastic differential equations”, Nova Sciens Publishers, Inc., 2011, p. 97-127.**

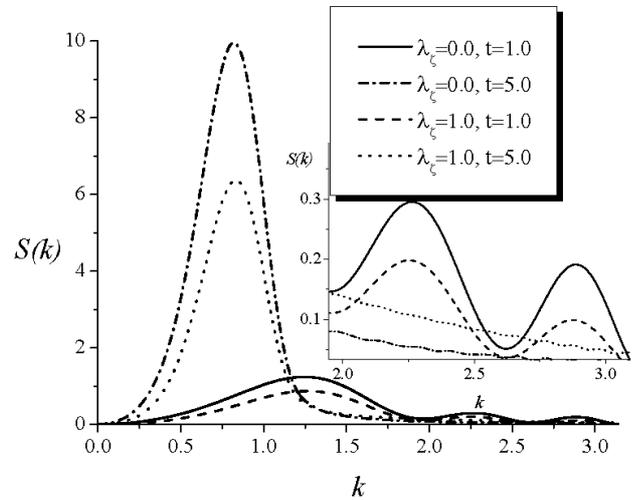
**Abstract** – We have considered phase separation processes in the hyperbolic model of spinodal decomposition. The model has been addressed to description of earlier and later stages of phase separation in binary systems deeply undercooled into spinodal region of phase diagram. To deterministic local equilibrium contribution and deterministic pure nonequilibrium contribution into spinodal decomposition, we have introduced the noise induced fluctuations which are defined as multiplicative fluctuations.

We have studied phase separation processes in a framework of formalism based on a local non-equilibrium hypothesis where effects of causal/delayed diffusion start to play an important role in decomposition processes. Such theory can be applied to the study of non-Newtonian fluids, viscoelastic bodies, rapidly solidifying alloys, materials deeply quenched into the spinodal region, and, generally, systems with memory. In the framework of such an approach, the Cahn-Hilliard theory was generalized for the case of slowly relaxing variables.

We have considered a binary system  $A_c B_{1-c}$  undergoing phase decomposition. To describe the system behaviour we introduce the composition field as local concentration difference,  $x = c - \bar{c}$ . The field  $x$  obeys the continuity equation:

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = -\nabla J \\ \tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \mathbf{J} = -M(x) \frac{\delta F[x]}{\delta x} + \sqrt{M(x)} \zeta(\mathbf{r}, t) \end{cases}$$

Considering early stages of decomposition we have shown that pattern selecting processes are possible only if memory effects are introduced into the dynamics of system (see Pic.1).



We have found that an increase in the noise spatial correlation radius accelerates such selecting processes. As a general outcome, therefore, one should conclude that spatially correlated noise makes the pattern selection faster in comparison with the pure deterministic case of spinodal decomposition.

We have derived the effective Fokker-Planck equation for the hyperbolic model describing phase separation with fluctuations. Using the exact stationary distribution functional for the concentration field we have discussed pattern selection processes at late stages of spinodal decomposition. It was found that: (i) pure non-equilibrium deterministic contribution leads to selection of more fine patterns appearing in spinodal decomposition; (ii) noise intensity increases thickness of the boundary between separating phases that make the phase interface more diffuse; (iii) multiplicative noise of the diffusion flux leads to a shift of the threshold wave-numbers where the selection of patterns is possible: with the increase the noise induced fluctuations the threshold (the critical wave number) shifts to larger values and selecting patterns become finer.

Performed within state budget subject “Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium”.

## МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІНИ МІКРОСТРУКТУРИ ОПРОМІНЮВАНИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ФАЗОВОГО ПОЛЯ КРИСТАЛУ

Д.О. Харченко, В.О.Харченко, С.В. Кохан, І.О. Лисенко – Інститут прикладної фізики  
НАН України

**Стаття направлена до Українського фізичного журналу.**

**Абстракт** — Проведено дослідження зміни мікроструктури систем, підданих дії балістичного потоку, що описує формування структурного безладу при опроміненні із використанням методу фазового поля кристалу. Виявлено, що внаслідок конкуренції регулярної та стохастичної компонент балістичного потоку в системі можливе формування структур з розмитими атомними густинами. Проведено дослідження динаміки дефектів при рекристалізації такої системи та встановлено характер зміни кількості дефектів залежно від статистичних властивостей балістичного потоку. Встановлено, що при рекристалізації просторові структури, сформовані при дії такого потоку, є стаціонарними і стійкими до термічних флуктуацій малої інтенсивності.

### 1. Модель

У рамках стандартного формалізму фазового поля кристалу періодична система та можливі структурні переходи в ній описуються зміною властивостей поля атомної густини  $\rho(\vec{r}, t)$ . Будемо розглядати однокомпонентні системи з властивостями  $\int d\vec{r} \rho(\vec{r}, t) = \rho_0, \rho_0 = const$ , для якої зміна вільної енергії  $\Delta F = F[\rho] - F[\rho_0]$  подається виразом

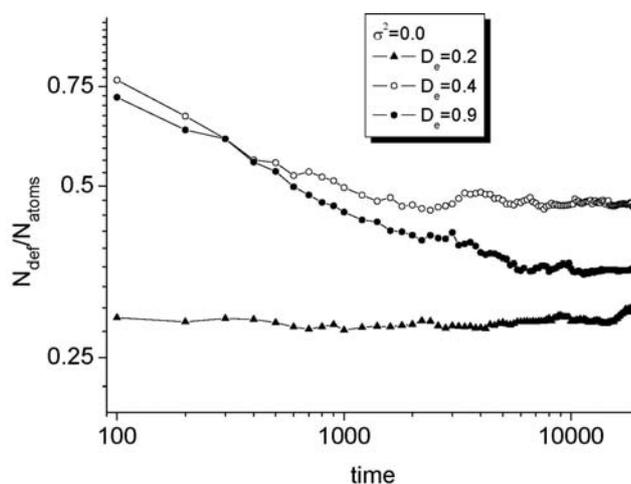
$$\frac{\Delta F}{T} = \int d\vec{r} \{ \rho(\vec{r}) \ln[\rho(\vec{r}) / \rho_0] - \Delta\rho(\vec{r}) \} - \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Delta\rho(\vec{r}_1) c^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \rho_0) \Delta\rho(\vec{r}_2)$$

де  $\Delta\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) - \rho_0$ ,  $c^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \rho_0)$  – доточкова кореляційна функція.

### 2. Результати

У рамках використання методу фазового поля кристалу проведено моделювання процесів зміни мікроструктури кристалічних систем у процесі опромінення, що характеризується внеском стохастичного потоку атермічного перемішування. Встановлено, що в ході опромінення відбувається розтоплення кристалічної структури на дефектах, що належать границям зерен. При цьому скорельована дія стохастичної компоненти балістичного потоку, конкуруючи із регулярно складовою потоку, сприяє підтриманню упорядкованої конфігурації

кристалу. При дослідженні процесів рекристалізації після зняття опромінення виявлено, що збуджена система переходить до стаціонарного стану із меншою кількістю точкових та лінійних дефектів (рис.1). У стаціонарному режимі виявлено, що шум зовнішнього потоку може приводити до формування просторових структур розподілу атомної густини, коли вона розмивається вздовж атомних площин у напрямку щільного пакування. Такі структури, будучи метастабільними, є стаціонарними за рахунок встановленої сильної взаємодії атомів з перекритими густинами. Перехід до рівноважної вихідної кристалічної конфігурації стає можливим лише при підвищенні температури системи.



**Рис.1.** Динаміка відносної кількості дефектів при рідних значеннях інтенсивності балістичного перемішування.

Робота виконана у рамках держбюджетної наукової роботи “Використання та адаптація програмних кодів за стандартом грід - технологій для мультимасштабного моделювання мікроструктурних перетворень у матеріалах реакторної техніки”.

## PATTERN SELECTION PROCESSES AND NOISE INDUCED PATTERN-FORMING TRANSITIONS IN PERIODIC SYSTEMS WITH TRANSIENT DYNAMICS

**D.Kharchenko, V.Kharchenko, I.Lysenko – Institute of Applied Physics, NAS of Ukraine**

**Published in Central European Journal of Physics, V.9, N.3, p698-709**

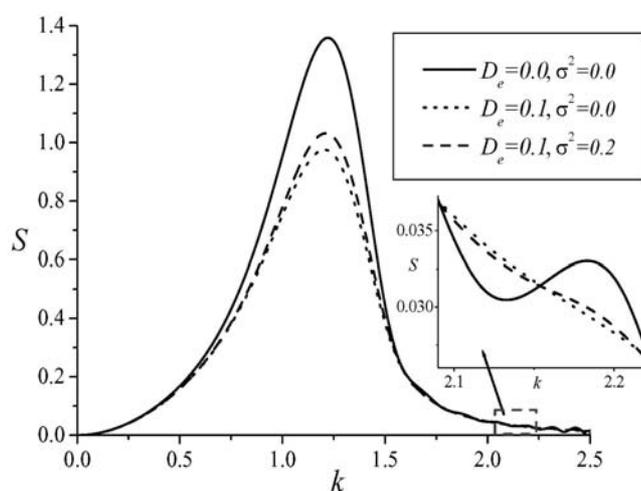
**Abstract** — We apply the phase field crystal method for nonequilibrium patterning to stochastic systems with external source where transient dynamics is essential. Considering a prototype model for a one-component periodic system subjected to external influence kind of irradiation we study properties of pattern selection processes and external noise induced pattern-forming transitions. These processes are examined by means of the structure function dynamics analysis. Nonequilibrium pattern-forming transitions are analyzed numerically.

### Main results

We have studied pattern selection processes in periodic stochastic systems with the hyperbolic transport. Considering the system with thermally sustained flux and flux of athermal mixing we discuss properties of pattern formation, selection and nonequilibrium pattern-forming transitions. The dynamics is studied in terms of both the first statistical moment and the structure function. Analytical results related to the linear stability analysis are compared with computer simulations. We have found that external athermal flux having both regular and stochastic components influences crucially on pattern selection processes. It was shown that regular part of the external flux suppresses such processes, whereas its stochastic component promotes the pattern selection (see fig.1). Considering pattern-forming transitions we have shown that external influence shifts the critical point of the transition where the regular and random components of the external flux act in competing manner.

The obtained results can be used to study pattern selection processes in pure materials, melts, block-copolymers, polymer solutions, glasses, generally in one-component systems under irradiation of high-energy particles. Our theoretical study is general but we believe that the discussed results can stimulate experimental investigations of pattern selection (microstructure transformations) and fluctuation-induced effects (noise-induced patterning transitions) in systems under irradiation. According to formulation of the modified phase field crystal method and proposition of its usage our stochastic model can be exploited to study microstructure transformations of nanocrystalline solids and pattern selection during irradiation of high-energy particles

(electrons,  $\alpha$ -particles, ions, etc.) when statistical properties of different defects generated by irradiation governs the system dynamics. Moreover, our results can be exploited to describe microstructure transformation in materials under sustained irradiation when dispersion of atomic relocation distances (stochastic effect) is realized. It depends on properties of irradiation source and statistics of high-energy particles in the flux.



**Fig.1.** Structure function at  $t = 2$  for  $\tau_D = 1.0$ ,  $r_c = 1.0$ ,  $\theta = 0.7$ .

Performed within state budget subject “Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium”.

## ВЛИЯНИЕ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА УМЕНЬШЕНИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ КОМПОЗИТОВ

Г. К. Чепурных – Институт прикладной физики НАН Украины

Статья отослана в журнал «Физика твердого тела»

**Абстракт** – Возможность улучшения качества материалов, полученных методами порошковой металлургии, состоит в уменьшении неоднородности нанопорошков путем использования вращающегося неоднородного магнитного поля. Для принципиального решения этого вопроса изучены эффективная теплопроводность, удельная теплоемкость и коэффициенты линейного теплового расширения кристаллов, созданных из порошкообразных полимеров, в зависимости от процентного содержания мелкодисперсного железа. Установлено значительное улучшение указанных характеристик в той серии образцов, которые готовили путем смешивания полимерной матрицы и железа во вращающемся неоднородном магнитном поле. В этом случае обнаружено аномальное изменение коэффициентов линейного теплового расширения в зависимости от процентного содержания железа при содержании железа менее 5 процентов.

### 1. Результаты

Результаты для теплопроводности приведены в таблице 1.

№ п/п	Композиция	Эффективная теплопроводность, $\lambda$ Вт/(м К)	
		Без ТМО	После ТМО
1	ПВДФ	0,21	0,21
	ПВДФ+20 масс. % Fe	0,24	0,57
	ПВДФ+100 масс. % Fe	0,55	1,37
2	ПА	0,29	0,42
	ПА+30 масс. % Fe	0,37	0,85
	ПА+100 масс. % Fe	0,62	1,69

Таблица 1 – Эффективная теплопроводность различных композитов с различным процентным содержанием мелкодисперсной железа, приготовленных в отсутствие магнитного поля и во вращающемся неоднородном магнитном поле с максимальной напряженностью  $H=105$  А/м

### 2. Выводы

При 20% добавлении мелкодисперсного железа эффективная теплопроводность композита на основе ПВДФ увеличивается в 2,7

раза после ТМО, а при 100% добавлении – в 6,5 раза. В случае композита на основе ПА ТМО увеличивает эффективную теплопроводность в 2,9 раза при 30% добавлении мелкодисперсного железа, и при 100% добавлении – в 5,8 раза.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

## ОСОБЕННОСТИ СОСТОЯНИЙ ФТОРИДА КОБАЛЬТА

Г. К. Чепурных – Институт прикладной физики НАН Украины

Статья опубликована в журнале «Журнал нано- и электронной физики», 2011, Т.3, № 4, сс. 160-166.

**Абстракт** – Поскольку конечной целью микроструктурных исследований реактор-ных материалов является получение рекомендации для решения проблемы создания конструкционных материалов для ядерной энергетики с повышенными эксплуатационными свойствами. И поскольку ультразвук является одним из возможных способов нанотехнологий, то в магнитострикционном фториде кобальта обнаружены новые состояния, необходимые для создания эффективных источников ультразвука.

### 1. Результаты

Для случая когда магнитное поле  $H \parallel EMA$  ( $EMA$  – ось легчайшего намагничивания) составлено и решено уравнение относительно угла  $\theta$ , определяющего ориентацию вектора антиферромагнетизма. Эти данные приведены в таблице 1.

H/H <sub>c</sub>	1,025	1,05	1,1	1,15	1,2	1,25
$\theta$ (град)	4, 282	6,181	9,081	11,518	13, 736	15,823

**Таблица 1** – Зависимость ориентации вектора антиферромагнетизма от величины магнитного поля

Из приведенной таблицы следует, что наиболее сильное (и непрерывное) изменение угла  $\theta$  с ростом магнитного поля (начиная с порогового поля  $H_c$ ) происходит в области значений поля близких к  $H_c$ , т. е.  $|H - H_c| \ll 1$ .

### 2. Выводы

1. В результате выполненных исследований выяснено, что найденные решения представляют интерес для дальнейших экспериментальных и теоретических исследований с целью обнаружения новых особенностей физических свойств области исследуемого фазового перехода.

2. Впервые на примере фторида кобальта обнаружено, что параметр порядка фазового перехода второго рода (в данном случае это угол  $\theta$ ) изменяется в окрестности критического (порогового) поля столь резко с изменением величины магнитного поля, что этот результат представляет техни-ческий интерес в смысле разработки различных реле.

3. Поскольку гигантская магнитострик-ция, обнаруженная в интерметаллических

соединениях TbFe<sub>2</sub> и DyFe<sub>2</sub> при комнатных температурах не может быть использована для создания малогабаритных и с высоким КПД источников ультразвука из-за того, что эти соединения обладают большой магнитокристаллической анизотропией, то обнаруженные особенности состояний во фториде кобальта в продольном магнитном поле, во-первых, открывают перспективу использования фторида кобальта в качестве рабочей части источника ультразвука, а, во-вторых, указывают один из путей исследования, указанных интерметал-лических соединений, с целью обнаружения областей высокой чувствительности к воздействию внешнего магнитного поля.

Работа выполнена в рамках госбюджетной научной работы “Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах удаленных от равновесия”.

## IS DNA'S RIGIDITY DOMINATED BY ELECTROSTATIC OR NON-ELECTROSTATIC INTERACTIONS?

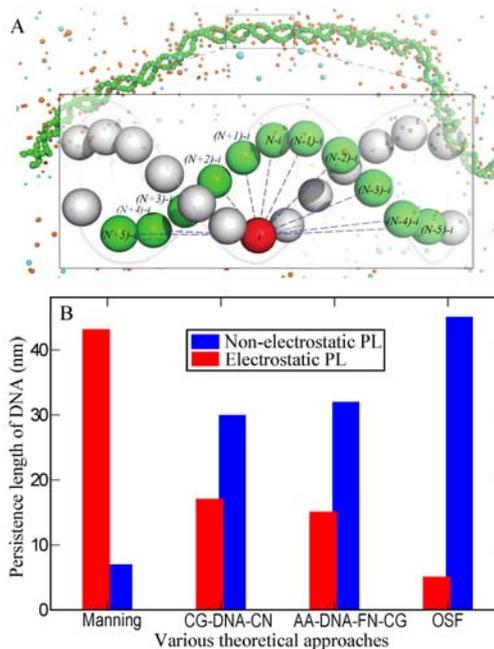
Alexey Savelyev — Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine; Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA; Chris K. Materese — Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA;

Garegin A. Papoian — Department of Chemistry and Biochemistry, Institute for Physical Science and Technology, University of Maryland, College Park, MD, USA; Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA;

**Status of the work - Published in the *Journal of the American Chemical Society (JACS)*, 2011, 133 (48), pp. 19290 - 19293. Publication date (Web): October 31, 2011. DOI: 10.1021/ja207984z. Communication.**

**Abstract** — Double-stranded DNA molecule is among the stiffest biopolymers, whose bending propensity crucially influences many vital biological processes. It is not fully understood what among the two most likely forces – electrostatic self-repulsion or the compressive base pairing stacking – plays a dominant role in determining the unique DNA stiffness [1]. Different theoretical and experimental studies led so far to contradictory results on this issue [1]. In this Communication we addressed this important problem by means of Molecular Dynamics (MD) simulations at two scales. Two independent and structurally identical coarse-grained (CG) models for the double-stranded DNA were used in the study (see Fig. 1A): (1) a chemically accurate CG model for the *normally charged* DNA developed in our prior work [2]; and (2) CG model for the *fully neutralized* DNA, which was systematically derived in this study from the corresponding all-atom MD simulations. We quantitatively estimated the role of electrostatic and elastic effects in regulating DNA flexibility by calculating DNA persistence length from models (1) and (2). We found that electrostatic and non-electrostatic effects counterbalance each other to a significant extent and both of them play a comparable role in maintaining DNA's stiffness. As seen in the Fig. 1B, our findings substantially differ from the predictions of existing well-recognized theories for DNA rigidity, such as celebrated theory of Odijk, Fixman and Skolnick [3] (OSF) and a conceptually different theory proposed by G. Manning [4]. The obtained results suggest that the current theoretical view of DNA flexibility may be in need of a major overhaul and, furthermore, additional experiments may be necessary to quantitatively investigate the extent of electrostatic and non-electrostatic contributions to DNA's persistent length.

Performed within state budget subject “ Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium ”.



**Fig. 1** (A) Our chemically accurate two-bead coarse-grained model of the DNA with explicit mobile ions [2] was extensively used in this study. To elucidate the role of electrostatics in mediating DNA rigidity we continuously reduced residual DNA charges without change of solvation and measured DNA's persistence length (PL) (CG-DNA-CN approach). Another set of results for the structurally identical *fully uncharged* DNA was obtained from the related all-atom MD simulations (AA-DNA-FN-CG approach). (B) Electrostatic and non-electrostatic portions of the DNA's PL obtained from different theoretical approaches: Manning's theory [4], our CG-DNA-CN and AA-DNA-FN-CG computational approaches, and OSF theory [3].

### References

- Peters, P. J.; Maher, L. J. *Quart. Rev. Biophys.* **2010**, 43, I, 23-63.
- Savelyev, A.; Papoian, G. A. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2010**, 107, 47, 20340-20345.
- (a) Odijk, T. *J. Poly. Sci. Poly. Phys. Ed.* **1977**, 15, 477-483. (b) Skolnick, J; Fixman, M. *Macromolecules* **1977**, 10, 944-948.
- Manning, G. S. *Biophys. J.* **2006**, 91, 3607-3616.

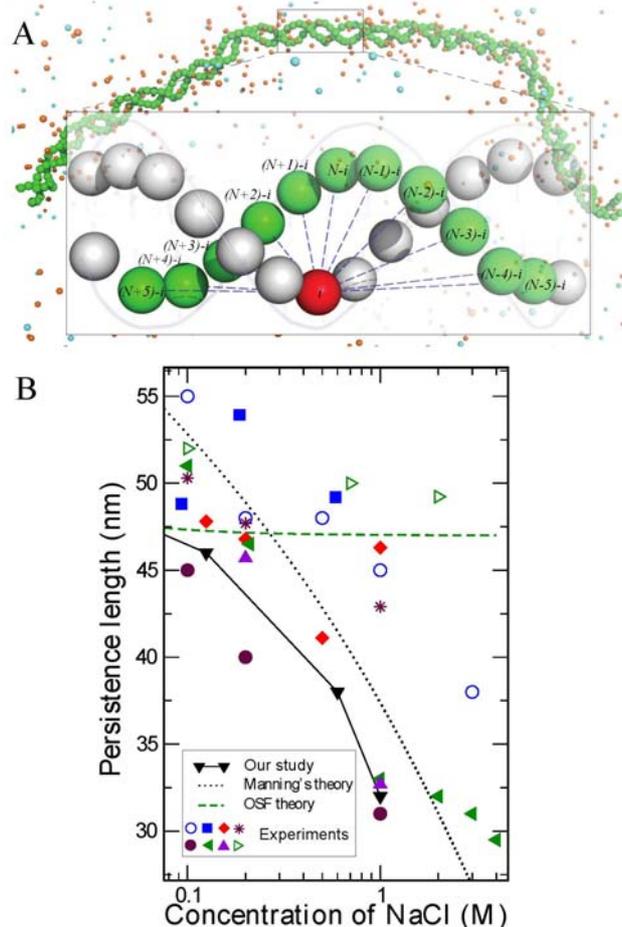
## DO MONOVALENT MOBILE IONS AFFECT DNA'S FLEXIBILITY AT HIGH SALT CONTENT?

Alexey Savelyev — Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine;  
Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA;

**Status of the work - Accepted for publication in the journal of *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*. DOI: 10.1039/C2CP23499H. Communication. This work is dedicated to the memory of my mentor, Professor Alexander I. Olemskoi, who untimely passed away in August, 2011.**

**Abstract** — Numerous theoretical and experimental studies disagree on the impact of surrounding mobile ions on DNA conformational flexibility at high salt content [1]. Specifically, it is not clear how varies the DNA persistence length when concentration of monovalent mobile ions is increased beyond physiological value of  $\sim 0.1$  M. This question is of fundamental importance since DNA greatly opposes bending required by many vital biological processes, such as chromatin assembly and viral packaging, and a complete understanding of how DNA structural rearrangements are regulated by a surrounding ionic atmosphere is missing. In the present Communication we addressed this biologically important issue computationally by means of Molecular Dynamics (MD) simulations. We utilized our accurate coarse-grained (CG) model for the double-stranded DNA with explicitly present mobile ions [2] to measure the DNA persistence length from MD simulations, at NaCl salt concentrations ranging from 0.1 M to 1 M, and compared our findings with existing controversial experimental data and theoretical predictions (see Fig. 1). Our results imply that DNA persistence length drops significantly by  $\sim 30\%$ , when ionic concentration increases from 0.1 M to 1 M, what is in near quantitative agreement with a number of experimental studies and G. Manning's theory [3] for DNA rigidity. At the same time, our results contradict some other experimental works and a celebrated theory of Odijk, Skolnick and Fixman (OSF) [4]. Despite a clarity on this issue, however, our recent computational study based on use of the same (as in this work) CG DNA model revealed support for neither OSF, nor Manning's theory, when the relative role of elastic and electrostatic interactions in maintaining DNA rigidity was investigated [5]. These combined results may indicate that an adequate theoretical description of DNA rigidity regulated by surrounding mobile ions remains an open question.

Performed within state budget subject "Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium".



**Fig. 1** We use our accurate computational model for DNA with explicit mobile ions [2] (A) to measure DNA's persistence length at moderate-to-high concentrations of NaCl ( $c \sim [0.1-1]$  M) from MD simulations. Our results (black symbols) are compared with controversial experimental data (color symbols) and theoretical predictions (dashed and dotted lines) (B).

### References

1. Peters, P. J.; Maher, L. J. *Quart. Rev. Biophys.* **2010**, 43, I, 23-63.
2. (a) Savelyev, A.; Papoian, G. A. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2010**, 107, 47, 20340-20345.
3. Manning, G. S. *Biophys. J.* **2006**, 91, 3607-3616.
4. (a) Odijk, T. *J. Poly. Sci. Poly. Phys. Ed.* **1977**, 15, 477-483. (b) Skolnick, J; Fixman, M. *Macromolecules* **1977**, 10, 944-948.
5. Savelyev, A.; Materese, C. K.; Papoian, G. A. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 19290-19293.

## COARSE GRAINING THE DNA: A NEVER ENDING QUEST

Davit A. Potoyan — Institute for Physical Science and technology, University of Maryland - College Park, MD, USA

Alexey Savelyev — Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine;  
Garegin A. Papoian — Department of Chemistry and Biochemistry, University of Maryland - College Park, MD, USA

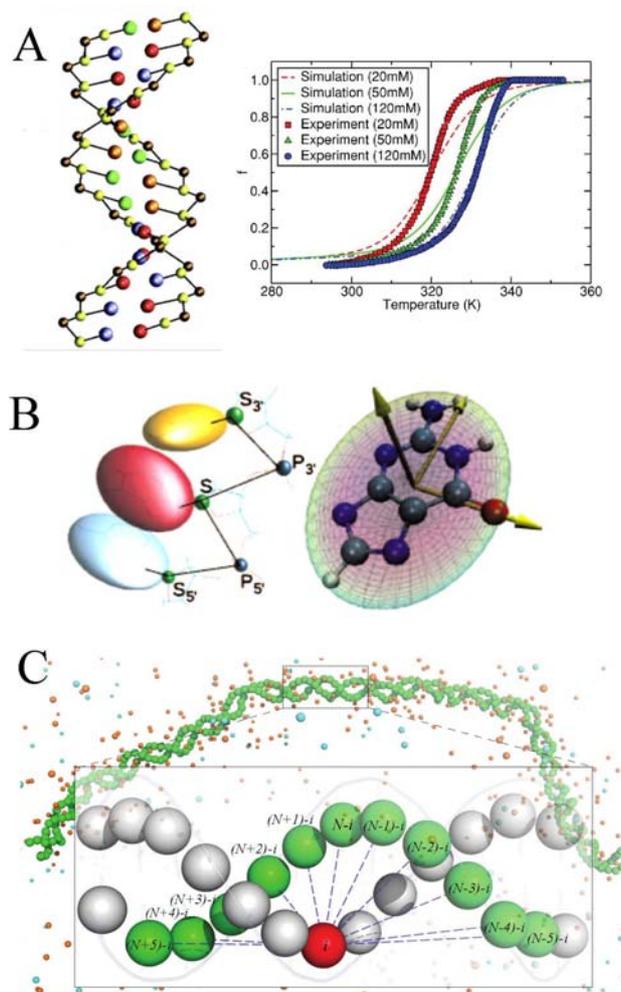
Status of the work - Under review in the *WIREs: Computational Molecular Science*. Review.

**Abstract** — The growing interest in the DNA based mesoscale systems of biological and non-biological nature has kindled the interest of the computational molecular science community to develop coarse grained representations of the DNA that will be simple enough to permit exhaustive simulations in a reasonable amount of time, yet complex enough to capture the essential physics at play. In the recent years there have been some major developments in the DNA coarse graining area and several fairly sophisticated models are now available that faithfully reproduce key mechanical and chemical properties of the double and single stranded DNA. However, there are still many challenges which limit the applicability of the present models and much has to be done yet to develop more reliable schemes which would have a predictive power beyond the target domain of the intrinsic parameterization. A development of robust, controllable and transferable coarse grained DNA force fields will provide an invaluable tool for gaining physical insights into the molecular nature of complex DNA based nano-scale entities such as the chromatin, virus capsids and DNA nano-composites. In the present contribution we provide an overview of the recent developments in the DNA coarse graining field. Our aim is to review the existing coarse grained models of the double stranded DNA, with detailed descriptions for some of the more promising ones that we deem as likely to find a niche in the DNA modeling field [1-3].

Performed within state budget subject №“ Statistical theory of creation and evolution of hierarchical defect structures in systems far off equilibrium ”.

### References

1. Sambriski, E. J.; Schwartz, D. C.; de Pablo, J. J. *Biophys. J.* **2009**, 96, 1675–1690.
2. Morriss-Andrews, A.; Rottler, J.; Plotkin, S. J. *Chem. Phys.* **2010**, 132, 035105.
3. Savelyev, A.; Papoian, G. A. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2010**, 107, 47, 20340-20345.



**Fig. 1** Some of the coarse-grained (CG) DNA models discussed in the review: (A) mesoscale model of DNA by *de Pablo et al* [1] (left) along with comparison of thermal melting curves from the CG simulations with experiments (right); (B) anisotropic model by *Plotkin et al* [2] with ellipsoidal beads corresponding to sugars (S) and phosphate groups (P). Schematic on the left shows the principal axes of the ellipsoid, which uniquely determine the orientation of the base; (C) chemically accurate model of DNA with explicit mobile ions by *Savelyev et al* [3] systematically developed from the underlying all-atom MD simulations.

# МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДВУМЕРНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ НОВОЙ ФАЗЫ, РАСПОЛОЖЕННОГО НА МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЕ

А.В. Коропов – Институт прикладной физики НАН Украины

**Статус работы (Вышла в журнале «Журнал технической физики», 2011, Т.81, Вып. 12, с. 83-88.)**

**Аннотация** – Проанализирована устойчивость формы плоского цилиндрического выделения новой фазы достаточно малого радиуса в процессе его диффузионного роста на межзеренной границе.

Экспериментальному и теоретическому исследованию поведения макроскопических включений в реальных кристаллах посвящено очень большое число работ (см., например, монографии [1-4]). К макроскопическим включениям в кристаллической матрице относятся, как известно [1-4], твердые частицы второй фазы, жидкие включения, вакансионные (незаполненные) поры, полости, заполненные газом. Твердые частицы второй фазы наблюдаются в композиционных материалах, стареющих (расслаивающихся) металлических сплавах, распадающихся пересыщенных твердых растворах.

Достаточно давно было обнаружено, что макроскопические включения, в частности твердые выделения новой фазы, часто образуются на границах зерен (межзеренных границах) поликристаллов. Такие выделения существенно влияют на механические и другие свойства макроскопических образцов, в частности прочностные, на конфигурацию диффузионных потоков атомов примеси или вакансий в образце, на кинетику и скорость диффузионного распада пересыщенного твердого раствора.

При теоретическом описании выделений новой фазы во многих случаях возникают вопросы об их зарождении, кинетике роста или уменьшения в размерах, перемещении как целого относительно решетки за счет направленного диффузионного движения атомов в поле внешних сил, устойчивости их геометрической формы (морфологической устойчивости) и др.

С точки зрения радиационной повреждаемости материалов реакторостроения наличие макроскопических включений в материалах влияет на их радиационную стойкость. В частности, выделения вторых фаз влияют на динамический баланс точечных дефектов в материале под облучением за счет ускорения рекомбинации точечных дефектов на межфазных

границах, и, соответственно, на набухание, распределение и параметры пористости [1]. Более конкретно, выделения вторых фаз дают эффект уменьшения средних концентраций точечных дефектов, тем самым затрудняя зарождение и рост вакансионных пор [1]. При изменении морфологии выделений изменяется их мощность как стоков точечных дефектов, а это, в свою очередь, может отразиться на поведении материала под облучением [1].

В настоящей работе теоретически рассматривается диффузионный рост твердого двумерного выделения новой фазы на межзеренной границе, имеющей конечную толщину  $\delta$  с учетом поверхностной кинетики роста на боковой поверхности выделения и диффузионных потоков атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе. Кроме того, в линейном приближении анализируется морфологическая устойчивость такого выделения. Высокая симметрия рассматриваемой задачи позволяет получить все окончательные формулы в замкнутом виде, что существенно облегчает их физический анализ.

Работа выполнена в рамках научной работы «Статистическая теория образования и эволюции иерархических дефектных структур в системах, удаленных от равновесия» (2007-2011 гг.).

## Список литературы

1. В.Н. Воеводин, И.М. Неклюдов. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. Киев: Наук. думка, 2006. 376 с.
2. В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. Радиационные дефекты и набухание металлов. Киев: Наук. думка, 1988. 296 с.
3. Я.Е. Гегузин, М.А. Кривоглаз. Движение макроскопических включений в твердых телах. М.: Металлургия, 1971. 344 с.
4. К.В. Чуистов. Старение металлических сплавов. Киев: Наук. думка, 1985. 232 с.

## СПОСОБ ВЫБОРА АЛГОРИТМА РАЗБИЕНИЯ ГРАФА ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Р.Ю. Лопаткин, В.А. Иващенко, В.В. Куприенко— Институт прикладной физики НАН Украины

Статус работы (Направлена в печать в журнал *Математические машины и системы*)

**Абстракт** — Предложен способ определения потенциально наиболее эффективного алгоритма разбиения заданного графа для распределенных вычислений, который опирается на результаты анализа статистической зависимости величины получаемого разреза (для того или иного алгоритма разбиения графа) от метрик графа.

В общем случае постановка задачи поиска минимального разбиения (иногда употребляется термин «минимальный разрез») графа формулируется следующим образом. Пусть дан неориентированный граф  $G = (V, E)$ , где  $V$  – множество его вершин,  $E$  – множество его ребер. Необходимо разделить множество  $V$  на  $k$  непересекающихся подмножеств таким образом, чтобы каждое из этих подмножеств имело приблизительно одинаковую мощность, но количество ребер, соединяющих вершины из разных подмножеств должно быть минимальным. Отметим, что эта задача имеет важное практическое применение в области параллельных вычислений для разбиения задач на подзадачи [1].

Известно, что эта задача относится к классу NP-полных задач, для решения которых на практике применяются эвристические алгоритмы, имеющие достаточно хорошую асимптотическую оценку точности найденного решения [2]. Как правило, выбор алгоритма происходит по каким-либо субъективным предпочтениям исследователя, что не всегда приводит к наилучшему результату.

Нами разработан способ определения потенциально наиболее эффективного алгоритма разбиения для заданного графа. Он использует результаты анализа статистической зависимости величины получаемого разреза (см. Рис. 1) с помощью того или иного алгоритма от определенных метрик графа. На основании этих данных имеется возможность оценки ожидаемого разбиения графа, который в свою очередь можно использовать как параметр модели для прогнозирования быстродействия параллельной программы.

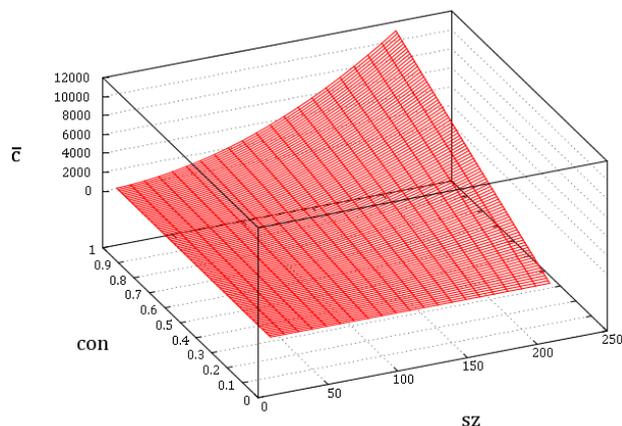


Рис. 1. Усредненная зависимость величины получаемого разреза ( $c$ ) от связности ( $con$ ) и размера графа ( $sz$ ) для алгоритма LND

### Список литературы

1. K. Schloegel., G. Karypis, V. Kumar, Sourcebook of parallel computing (San Francisco: Morgan Kaufmann Publishers Inc.: 2003).
2. B. Hendrickson and T.G. Kolda. J. Parallel Comput. **26** No16, 1519, (2000).

## **ЯЗЫК ПРОГРАММИРОВАНИЯ GROOVY КАК СРЕДСТВО ОПИСАНИЯ МУЛЬТИАГЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ**

**Р.Ю. Лопаткин, В.А. Иващенко — Институт прикладной физики НАН Украины**

**Статус работы (Направлена в печать (10.2011) в журнал Вестник черниговского государственного технологического университета)**

**Абстракт** – предлагается использование методологии метапрограммирования для упрощения описания мультиагентных моделей, предложена архитектура системы для мультиагентного моделирования в рамках данного подхода, а также решаются связанные с этим подходом технические вопросы.

Методология метапрограммирования выбрана не напрасно – она используется нами для устранения недостатков известной платформы Java, которая, как мы считаем, решает множество проблем связанных с выполнением кода моделей: она обеспечивает кроссплатформенность разработанных приложений, решает немаловажный вопрос безопасности их выполнения. Вопрос безопасности становится особо остро в случае создания распределенных систем моделирования, когда код модели может передаваться системе моделирования с удаленной машины. А, как известно, вопросы безопасности и ограничения доступа можно решать с помощью развитых стандартных средств платформы Java [1]. Но с другой стороны при использовании платформы Java возникают некоторые проблемы с гибкостью созданных решений, избыточностью кода моделей не только в плане избыточности самого кода Java, но и в плане наличия в таком случае множества «шаблонных» конструкций, присутствующих моделям.

Но эти проблемы можно решать использованием современных языков программирования, ориентированных на платформу Java, реализующих новые концепции программирования не присущие языку Java. Поэтому с целью создания основы специализированного языка программирования для описания моделей мы использовали Groovy [2], как одну из самых удачных, на наш взгляд, реализаций такого языка, поддерживающего концепцию метапрограммирования.

Предложенный нами подход, основанный на Groovy, в сочетании с предложенной архитектурой построения системы мультиагентного моделирования позволяет с одной стороны использовать преимущества платформы Java, а с другой стороны устраняет некоторые недостатки стандартного языка

программирования Java, которые касаются построения подобных систем. К преимуществам в данном случае можно отнести: полное разделение логики модели и интерфейсов управления, гибкость и кроссплатформенность создаваемых решений, безопасность выполнения моделей, что не всегда присуще другим кроссплатформенным решениям. Кроме того, предложенный нами подход позволяет предоставлять пользователям возможность менять язык описания моделей в соответствии с их потребностями.

Необходимо отметить, что разработчики известной среды моделирования Repast Symphony [3] также используют язык программирования Groovy, но не предоставляют пользователям средств для модификации языка описания моделей.

Робота виконана в рамках держбюджетної теми “Розробка інтерактивних мікро-процесорних систем для комп’ютеризації навчального експерименту”.

### **Список послань**

1. Java SE Security [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.oracle.com/technetwork/java/javase/tech/index-jsp-136007.html> - Заголовок с экрана.
2. Groovy - Home [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://groovy.codehaus.org/> - Заголовок с экрана.
3. C.M. Macal. Repast Symphony Runtime System, in C.M. Macal, M.J. North, and D. Sallach (eds.), Proceedings of the Agent 2005 Conference on Generative Social Processes, Models, and Mechanisms, ANL/DIS-06-1, cosponsored by Argonne National Laboratory and The University of Chicago, Oct. 13–15, 2005.