

процедура обробки й аналізу зразків відбувається за звичайних температурних умов з використанням відповідного типу полімерази, що позбавляє необхідності використовувати ампліфікатор. Завдяки цьому дану методику можна використовувати навіть у польових умовах.

Багатообіцяючим можна вважати також метод нанопорного секвенування, що передбачає використання відповідного портативного пристрою на кшталт MinION від компанії Oxford Nanopore Technologies, вага якого не перевищує 100 грамів. Принцип його дії полягає у використанні мікроскопічних отворів, через які молекула ДНК проходить під впливом електричного поля. Під'єднання даного приладу до ноутбуку за допомогою USB забезпечує безпосереднє зчитування сигналу від кожного нуклеотиду і побудову їх послідовності в реальному часі [4]. Первинна обробка даних може здійснюватися з використанням програмного забезпечення epi2mi.

Список використаних джерел:

1. *Сучасні проблеми молекулярної біотехнології* / [С. І. Дубінін, В. О. Пілюгін, В. А. Ваценко та ін.]. – Полтава, 2016. 395 с.
2. Кушнір Г. П., Сарнацька В. В. *Мікроклональне розмноження рослин. Теорія і практика*. Київ, 2005. 270 с.
3. <https://academic.oup.com/nar/article/28/12/e63/2359194?login=false>
4. *Створено портативний пристрій для секвенування геному*. URL: <https://nachasi.com/news/2018/01/31/prystrij-dlya-sekvenuvannya-genomu/> (дата звернення 12.05.2025 р.)

2D ДИФУЗИЯ І ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В БЕЗГРАДІЄНТНИХ АДСОРБОВАНИХ ПЛІВКАХ: ТЕОРІЯ ТА ЕКСПЕРИМЕНТ

Лобурець А.Т. (м. Полтава), Заїка С.О. (м. Київ)

Двовимірні (2D) фазові переходи є універсальним інструментом для вивчення фундаментальних властивостей матеріалів та квантових систем, а також мають практичне значення для розробки нових технологій у наноматеріалах, спінтроніці, гнучкій електроніці й квантових пристроях і зараз широко застосовуються в найрізноманітніших фізичних, матеріалознавчих та біофізичних системах. Наприклад, перехід із гелеподібного в рідиноподібний

стан у ліпідних моношарах на воді, феромагнетизм в ультратонких адсорбованих плівках, Kosterlitz–Thouless-перехід у плівці надплинного гелію, колоїдні кристали на інтерфейсах, Kosterlitz–Thouless-перехід, що визначає початок надпровідності, та інше.

Для своїх досліджень ми вибрали адсорбційну систему із сильно вираженою анізотропією атомної будови грані монокристала-адсорбента. Такими є грані (112) о.ц.к. Відповідно і потенціальний рельєф такої грані буде однозначно відтворювати просторове розташування поверхневих атомів підклади. Це можуть бути дуже різноманітні системи, наприклад, дифузія та адсорбція молекул рідини у капілярах або ж *поровому просторі нафтового пласта*, процеси легування металів, формування відповідних електронних переходів у напівпровідниках, гетерогенному каталізі тощо.

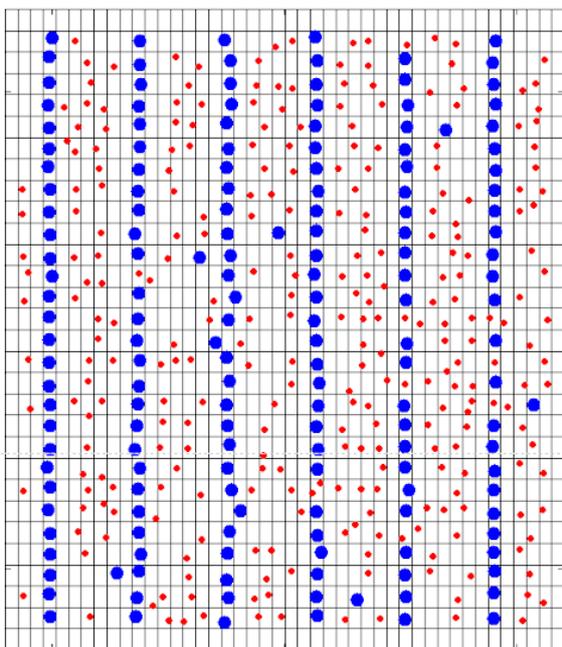
Метою роботи є вивчення на атомарному рівні процесів 2D дифузії у сильно анізотропному середовищі з використанням створеної нами математичної моделі з урахуванням характеру потенціалів латеральної взаємодії частинок. Така взаємодія у випадку відштовхування між частинками може проявлятися на віддальх в десятки ангстрем, що сильно урізноманітнює характер фазових переходів і ускладнює використання рівнянь стану речовини. Особливо це відчутно у випадку багатоконпонентних сумішей, якими є вуглеводні. Важливою особливістю молекул вуглеводнів є їхня геометрична будова. Це кількість атомів карбону у молекулі (довжина аліфатичного ланцюжка у нормальних алканах та наявність розгалужень у молекулах ізомерів). У випадку газової фази результат взаємодії при зіткненні двох молекул залежатиме ще й від їхньої взаємної орієнтації на момент зіткнення.

Як справедливо відмічають автори оглядової роботи [1], для визначення параметрів двовимірного плавлення методами комп'ютерного моделювання часто застосовуються кілька взаємодоповнюючих методів, але перш за все розраховуються рівняння стану. Вивчення фазових переходів у двовимірних

системах пов'язане з труднощами. Тому й доводиться використовувати взаємодоповнюючі методи. У випадку фазових переходів першого роду на ізотермах спостерігається утворення петель Майєра-Вуда, які є аналогами петель Ван дер Ваальса при температурах, нижче критичної. Для визначення границь фазових переходів використовують побудови Максвела. Це відрізки ліній ізобар, що відсікають рівні площі вгорі і внизу кожної ізотерми петлі Маєра – Вуда.

Відомо, що в однокомпонентній системі на фазовій діаграмі, побудованій в координатах температура – тиск, лінії кипіння та конденсації збігаються. У випадку двокомпонентної суміші ці лінії розщеплюються, утворюючи петлю. У таких системах (дво- і багатокомпонентних) спостерігаються ретроградні процеси (зворотна конденсація). Відмітимо, що експериментально петлі Маєра - Вуда на залежностях тиск – температура не спостерігаються. Це є особливістю кубічної залежності тиску від об'єму (густини), що впливає з рівняння Ван дер Ваальса. Це рівняння є дуже недосконалим, оскільки воно незадовільно відображає залежність густини рідкої фази від температури. У нафтогазовій справі рівняння Ван дер Ваальса не використовується через його погану відповідність реальним системам. Досить вдалим для практичного застосування виявилися кубічні відносно об'єму рівняння, запропоновані Редліхом – Квонгом, Пенгом – Робінсоном та Саове – Редліхом – Квонгом, які по суті є удосконаленими рівняннями Ван дер Ваальса. Існує досить велика кількість модифікацій названих вище рівнянь, виконаних іншими авторами, наприклад, зовсім недавніх [2, 3]. Це є свідченням достатньо високої ефективності рівнянь навіть для нафтогазової справи. Недоліком модифікацій є те, що вони не є універсальними і їх потрібно адаптувати під кожну конкретну задачу (знайти як правило невідомий для 2D систем ацентричний фактор Пітцера). На жаль при використанні комп'ютерного моделювання для аналізу характеру фазових переходів у 2D плівках найпростішого кубічного рівняння може привести до неправильної інтерпретації

даних. Обійшовши перелічені вище труднощі, ми створили власну математичну модель дифузії, структуроутворення та термічного руйнування субмоношарових плівок, відмовившись від використання рівнянь стану і розробивши власні методи та використовуючи відомі [4]. Приклад результатів, одержаних нами завдяки своїй математичній моделі дифузії в обмеженому (поровому) просторі, показано на рисунку.



Великими дисками означено стінки пор. Видно отвори, які сполучають пори. Матриця даних, використаних при візуалізації результатів комп'ютерного експерименту, несе повну інформацію про фазовий стан речовини та її термодинамічні і кінетичні характеристики. На рисунку показано лише один кадр із 5×10^6 ітерацій.

Список використаних джерел:

1. Ryzhov V. N. et al. Scenarios of melting of two-dimensional systems: possibilities of computer modeling // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2023. Vol. 164, No 1. P. 143–171.
2. Zhao W. et al. Modified Alpha Function for Peng-Robinson Cubic Equation of State // *Chemical Engineering Transactions*. 2020. Vol. 81. P. 547–552.
3. Vorobiova H. et al. Effect detection of using a modified Redlich-Kwong-Aungier equation of state on the calculation of carbon dioxide flow in a centrifugal compressor // *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2024. Vol. 2, No. 8 (128). P. 54–65.
4. Zaika S. O., Loburets A. T., Fedorus O. H. Phase transitions in anisotropic submonolayer adsorbed films // *NANO-2023 : selected proceedings of the 11th International Conference on Nanotechnology and Nanomaterials, August 16–19, 2023, Bukovel, Ukraine / O. M. Fesenko, L. V. Yatsenko (eds.) – Cham : Springer, 2024. P. 397–405.*