УДК 541.16

S. F. Matar
Lebanese German University (LGU), Computational Materials and Molecular Science (CMMS), Sahel-Alma, Jounieh, Lebanon
s.matar@lgu.edu.lb

Нові високосиметричні надтверді алотропи C_{48} і C_{32} з оригінальною топологією: кристалічна інженерія та дослідження з перших принципів

*Запропоновано нові високосиметричні об'ємноцентровані алотропи вуглецю: кубічний C_{48} і тетрагональний C_{32} з відповідними оригінальними топологіями "**ana**" і "**ukc**". Розроблені на основі інженерії кристалічної структури, їхні структури основного стану та фізичні властивості, які обумовлені енергією, було тримано з достатньою точністю з розрахунків квантової механіки в рамках теорії функціонала густини. Обидва алотропи, що складаються з викривлених тетраедричних С4-структур, виявилися щільними з ρ = 3,50 г/см^3. Ці алотропи мають когезивні, хоча і метастабільні структури основного стану, порівняно з алмазом, і демонструють стабільність з механічного (пружні властивості), динамічного (фононні структури зон) та термодинамічного погляду, що свідчить про зв'язок з експериментальними дискретними результатами C_V = f(T) для алмазу. Значення твердості за Віккерсом $H_V(C_{48})$ = 47 ГПа та $H_V(C_{32})$ = 59 ГПа вказує, що матеріали є надтвердими. Електронні структури смуг варіюються від великої прямої ширини забороненої зони ~ 5 еВ для C_{48} до непрямої ширини забороненої зони ~ 2,5 еВ для напівпровідникового C_{32}. Такі відкриття оригінальних алотропів з цільовими фізичними властивостями неодмінно збагатять сферу досліджень алотропів вуглецю, особливо високосиметричних.*

***Ключові слова**: теорія функціонала густини, алотропи вуглецю, твердість, фонони, електронна структура.*

ВСТУП

Поточні дослідження в галузі вуглецю зосереджено на оригінальних алотропах, що наближаються до механічних та електронних фізичних властивостей алмазу. Багато з них знаходять "штучно" завдяки спеціально розробленим програмам [1, 2]. Тим не менш, підходи, засновані на інженерії кристалохімії, можуть допомогти в пошуку алотропів, таких як ті, що мають властивості, пов'язані з механізмами перетворення 2D (м'які) → 3D (тверді) (D позначає вимір) [3], або у виявленні алотропів із надтвердою поведінкою завдяки оригінальним малим структурним блокам, таким як циклопропан-подібний *C3* [4], а також надщільних надтвердих оригінальних алотропів [5].

Доступна в Інтернеті база даних SACADA (https://www.sacada.info) служить бібліотекою вуглецевих структур, класифікованих за різними топологіями за допомогою програми TopCryst [6]: алмаз (кубічний) позначений як "**dia**", а його рідкісна гексагональна форма "лонсдейліт" позначена як "**lon**".

© S. F. MATAR, 2026

За твердістю за Віккерсом, що становить $H_V \sim 95$ ГПа, алмаз визнаний найтвердішим матеріалом. Він має високу щільність $\rho \sim 3{,}55$ г/см^3, що обумовлено ковалентним характером коротких зв'язків C–C ($d_{C–C} \sim 1{,}54$ Å) в ідеально тетраедричному вуглеці типу C(sp^3). Проте, була виявлена виняткова особливість штучного алотропу вуглецю **qtz** C_6 (тобто топології на основі кварцу) [7], який виявився щільнішим за алмаз, за $\rho = 3{,}67$ г/см^3 і, відповідно, більшою твердістю за Віккерсом: $H_V \sim 100$ ГПа. Цей алотроп зараз каталогізований у базі даних SACADA під № 1190. Щодо алмазу, **qtz** C_6, як і інші штучні алотропи вуглецю, є метастабільним через меншу когезію, як і два нових алотропи. Інша особливість може бути спостережена в тетраедричних алотропах, а саме спотворення тетраедра *C4* з кутами, що відхиляються від ідеального кута ∠C–C–C 109,47°.

Починаючи з хімічної інженерії кристалічної структури тетраедричного укладання *C4*, було отримано надтверді C_{48} і C_{32} з високою симетрією і великою стехіометрією, які згодом було ідентифіковано за допомогою оригінальних топологій "**ana**" і "**ukc**", що не задокументовані в базах даних. Зокрема, було виявлено, що кубічний C_{48} має найвищу симетричну просторову групу *Ia*-3 № 230 серед усіх 3D-алотропів вуглецю, зокрема і алмазу (просторова група *Fd*-3*m* № 227). Це також стосується другого алотропа, об'ємноцентрованого тетрагонального C_{32}. Фізичні властивості було отримано на основі розрахунків квантової механіки, що відображають енергію когезії, а також механічні, динамічні та електронні властивості структури зон.

ТЕОРЕТИЧНА БАЗА ТА МЕТОДОЛОГІЯ РОЗРАХУНКІВ

Квантово-механічні розрахунки було проведено в рамках теорії функціонала густини (ТФГ) [8, 9]. Для отримання структур основного стану розроблених алотропів, що відповідають мінімальним значенням енергії, було використано код Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [10, 11]. Атомні потенціали, що враховують валентні стани, побудовані за методом Projector Augmented Wave (PAW) [11, 12], було використано в рамках узагальненої градієнтної апроксимації (УГА) [13], що враховує ефекти обмінної кореляції (ОК) ТФГ. Більш детальну інформацію про методологію розрахунків можна знайти в попередніх роботах [2, 3]. Розраховані пружні константи C_{ij} обробляли за допомогою онлайн-програми ELATE [14] для отримання модулів всебічного стиску (B) та зсуву (G) за допомогою методу усереднення Фойгта [15], тобто B_V та G_V. Для оцінки твердості за Віккерсом (H_V) на основі B_V і G_V було використано мікроскопічні теорії твердості [16, 17]. Для оцінки динамічної стабільності було отримано структури фононних зон з високою роздільною здатністю зон Бріллюена [18]. Для електронних структур смуг використано метод ASW на основі ТФГ з апроксимацією УГА [19]. Для візуалізації кристалічних структур і проекцій щільності заряду використано програму VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) [20].

КРИСТАЛОХІМІЯ

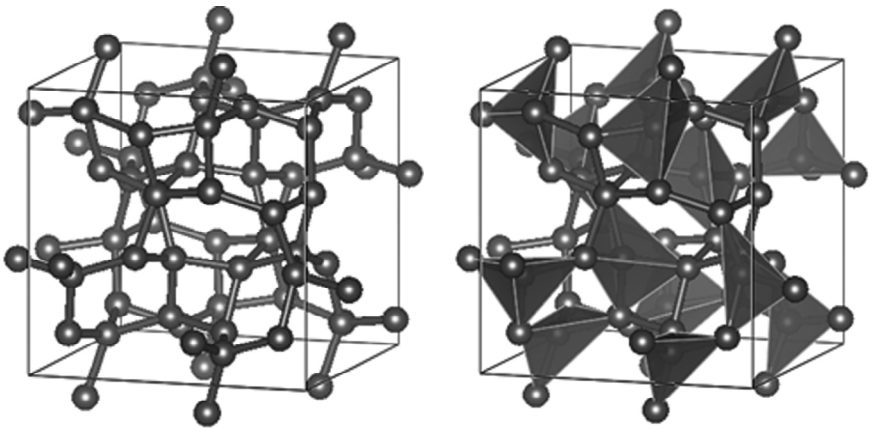
Оригінальному C_{48} характерна кубічна симетрія з об'ємноцентрованою кубічною просторовою групою *Ia*-3 № 230. Слід зауважити, що це найвища симетрична просторова група алотропа вуглецю в центрі "*I*", якщо брати до уваги те, що (кубічний) алмаз представляє просторову групу "*F*" (центр грані): *Fd*-3*m* № 227. Крім того, примітивна центризація "*P*" характеризує (рідкісну) гексагональну форму алмазу лонсдейліту просторовій групі $P6_3/mmc$ № 194. Використання програми Topcryst [6] привело до топології **ana**, яку,

наскільки автору відомо, не задокументовано в SACADA або будь-якій іншій базі даних. Параметри ґратки наведено в табл. 1, а структуру в кульково-стрижневій та поліедральній формах представлено на рис. 1, *а* ліворуч і праворуч. Остання проекція показує спотворені тетраедри з кутами, що відхиляються від 109,47°, як показано в табл. 1, але найкоротша відстань між атомами вуглецю становить 1,54 Å, що наближається до міжатомної відстані в алмазі. Це можна очікувати, оскільки координації атомів є тетраедричними. Всі 48 атомів вуглецю належать до єдиної позиції Вікоффа (48*g*) просторової групи *Ia*-3. Енергія когезії –1,76 еВ/ат. нижча за енергію алмазу, яка становить –2,47 еВ/ат. Отже, C_{48} є метастабільною системою порівняно з алмазом, а розрахована щільність 3,17 г/см^3 є нижчою.

Таблиця 1. Властивості кристалічної структури нових кубічних C_{48} і тетрагональних C_{32}

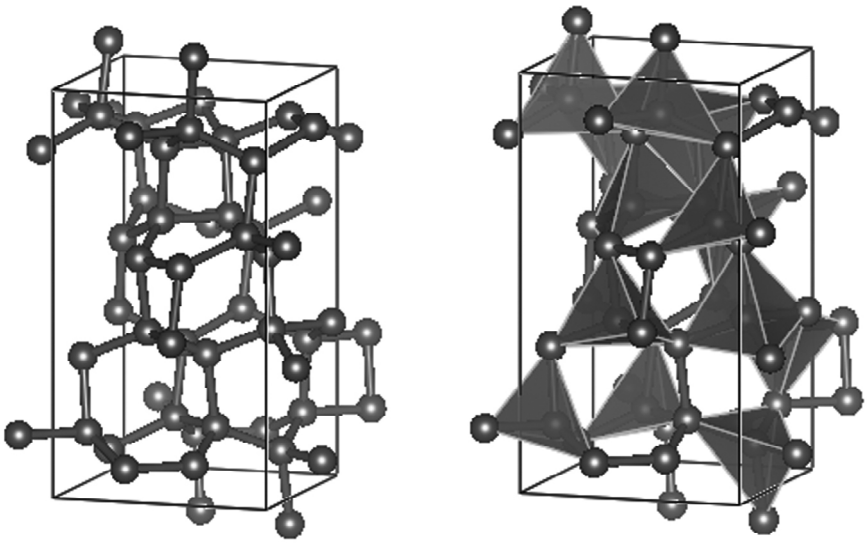
Топологія Алотроп Просторова група №	**ana*** C_{48} кубічний *Ia*–3 № 230	**ukc**** C_{32} тетрагональний *I*41/*acd* № 142
a / *c*, Å	6,7087	4,6946 / 8,7048
Кут ∠C–C–C, град	85 / 125	89 / 103
Найкоротша відстань *d*–*d*, Å	1,54	1,52
$V_{\text{гратка}}$, Å^3	301,93	191,85
$V_{\text{гратка}}$/ат., Å^3	6,29	5,98
Густина, г/см^3	3,17	3,34
Атомні позиції	C(48*g*) 0,6588, 0,0912, 0,875	C(32*g*) 0,6283, 0,0979, 0,9094
$E_{\text{заг}}$, еВ	–401,27	–271,84
$E_{\text{заг.}}$/ат., еВ	–8,36	–8,49
$E_{\text{ког}}$/ат., еВ	–1,76	–1,89

***ana**; 4/4/c5; sqc11219; ANA
****ukc**; 4/4/t73



а

Рис. 1. Кристалічні структури в кульково-стрижневій (ліворуч) та поліедральній (праворуч) формах: *а* – C_{48}; *б* – C_{32}.



б

Рис. 1. (Продовження).

Другий алотроп C_{32} був ідентифікований в просторовій групі $I4_1/acd$ (№ 142) з найвищою симетрією об'ємноцентрованої тетрагональної ґратки. З дотриманням того ж протоколу, що і для C_{48}, для ідентифікації топології було запропоновано позначення **ukc**. Ця топологія також не знайдена в SACADA та інших базах даних, що підтверджує оригінальність роботи. Структуру показано на рис. 1, *а*, *б*, а в табл. 1 наведено параметри структури основного стану. C_{32} характеризується вищою щільністю $\rho = 3{,}34$ г/см^3 завдяки коротшому d(C–C) = 1,52 Å і меншому атомному об'єму порівняно з C_{48}. Як показано далі, можна очікувати більшої твердості. Конструкційні блоки є спотвореними тетраедрами *C4*, як показано на рис. 1, *б* з поліедральним зображенням; вони в основному мають спільні кути, але також можна спостерігати тетраедри зі спільними ребрами. Кути ∠C–C–C становлять 89° і 103°, що вказує на спотворені тетраедри. Як і в алотропі C_{48}, всі атоми належать до єдиної позиції Вікоффа (32*g*) просторової групи $I4_1/acd$. Енергія когезії нижча (краща), але залишається нижчою за алмазну, а C_{32} також є метастабільним алотропом.

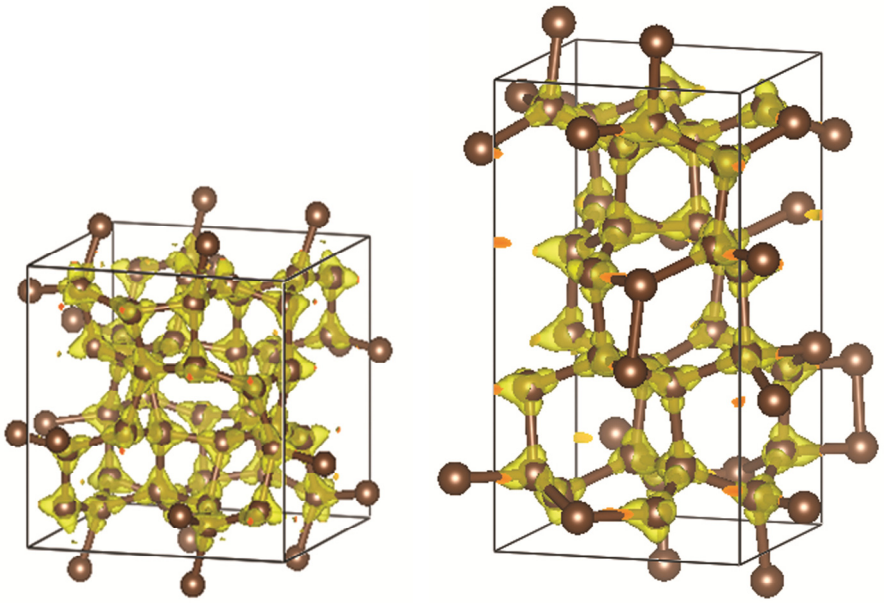
Якісний опис густини заряду

Тетраедричний характер вуглецевого середовища краще оцінювати за проекціями об'ємів щільності заряду. На рис. 2, *а*, *б* показано об'єми щільності заряду (жовтого кольору) навколо і між атомами вуглецю. На цих рисунках видно спотворені форми тетраедрів. Крім того, щільності заряду мають особливості, пов'язані з відокремленням одного від іншого. Таку локалізацію буде далі додатково проілюстровано в дослідженні електронних структур зон.

МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ

Механічні властивості було отримано за допомогою виведення пружних констант з використанням скінченних деформацій кристалічної ґратки. Розраховані пружні константи C_{ij} (i та j позначають напрямки) наведено в табл. 2. Всі значення C_{ij} є додатними, що свідчить про стабільність двох ало-

тропів. За допомогою програми ELATE [18] було отримано модулі всебічного стиску B та зсуву G через усереднення Фойгта [19] пружних констант, а саме B_V та G_V. Більші значення обох спостерігали для C_{32} порівняно з C_{48}. Проте ці значення залишаються нижчими за значення для алмазу: B_V = 444 ГПа та G_V = 534 ГПа [21].



а *б*

Рис. 2. Проекції щільності заряду (жовті об'єми), що демонструють тетраедричну конфігурацію навколо атомів вуглецю: *а* – C_{48}; *б* – C_{32}.

Таблиця 2. Константи пружності й усереднені за Фойгтом модулі всебічного стиску B_V і зсуву G_V та твердості за Віккерсом H_V (ГПа)

C_{ij}	C_{11}	C_{22}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	B_V	G_V	G_V/B_V	H_V^1	H_V^2
C_{48}	710	710	149	149	710	311	311	311	336	299	0,89	46	47
C_{32}	965	972	91	129	759	399	313	331	376	365	0,97	58	59

В обох алотропах значення B_V вищі за G_V. Було розраховано відповідні коефіцієнти Пуга G_V/B_V [22], що стосуються критерію пластичність–крихкість. Для $G_V/B_V < 1$ очікували тенденцію до пластичної поведінки, тоді як для $G_V/B_V > 1$ – крихку поведінку. Дійсно, для алмазу, відомого своєю високою крихкістю, G_V/B_V = 1,20. Відповідні коефіцієнти для двох нових алотропів вуглецю нижчі за одиницю, що дозволяє очікувати помірну пластичність. Проте значення, близьке до одиниці для C_{32}, вказує на тенденцію до крихкості.

Такі тенденції відображаються у відмінностях твердості за Віккерсом H_V, розрахованої за двома моделями мікроскопічної теорії твердості:

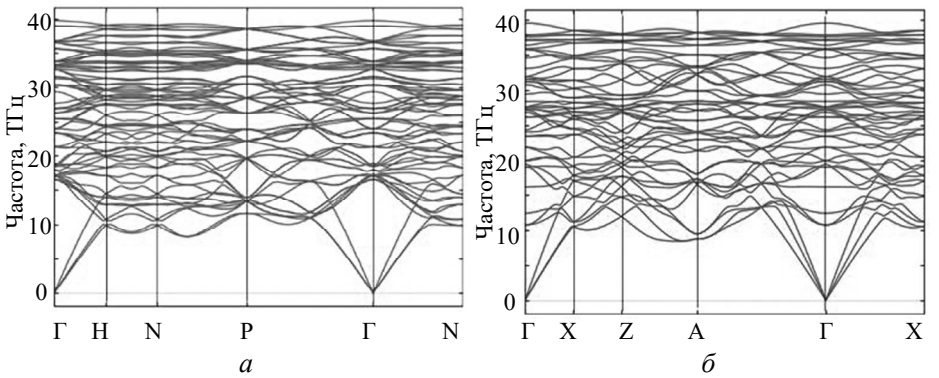
$$H_V^1 = 0{,}92(G_V/B_V)^{1{,}137}G_V^{0{,}708}\ [16];$$

$$H_V^2 = 2(G_V^3/B_V^2)^{0{,}585}-3\ [17].$$

Відповідні значення твердості за Віккерсом H_V, отримані двома методами, наведено в останніх двох стовпчиках табл. 2. Вони є близькими до більших значень твердості, що характеризує C_{32}. Отже, обидва алотропи можна вважати надтвердими.

ДИНАМІЧНІ ТА ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ

Додаткове підтвердження існування нових алотропів було отримано на основі динамічної стабільності, перевіреної за допомогою аналізу їхніх фононних властивостей. Структури фононних зон, отримані з високою роздільною здатністю зони Бріллюена відповідно до методу, запропонованого у [18], показано на рис. 3. Смуги (хвилясті лінії) розвиваються вздовж основних напрямків відповідної зони Бріллюена, тобто кубічної та тетрагональної, вздовж горизонтальної осі *x*. Вертикальні лінії розділяють їх для кращої візуалізації. Вісь *y* представляє частоти ω, задані в терагерцах. Через велику кількість атомів у двох алотропах у розрахунках враховували об'ємноцентровані ґратки, що становлять половину кількості атомів.



а *б*

Рис. 3. Фононні зонні структури: *а* – C_{48}; *б* – C_{32}.

Структури фононних зон складаються з 3*N* зон (*N* – кількість атомів) з трьома акустичними модами, що починалися від нульової енергії (ω = 0) у центрі зони Бріллюена до декількох терагерц (ТГц). Три акустичні зони пов'язані з жорсткими перетвореннями кристалічної решітки: дві поперечні і одна поздовжня. За ними слідують 3*N*-3 оптичні смуги з більш високими енергіями, як показано на рис. 3, розраховані частоти фононів є позитивними. Це свідчить про динамічну стабільність алотропів. Найвищі смуги спостерігали в діапазоні ~ 40 ТГц. Такі значення близькі до спостережуваних для алмазу за допомогою раманівської спектроскопії [23], що дозволяє очікувати певного зв'язку з алмазом, який додатково підтверджується електронними структурами смуг, наведеними нижче.

Термодинамічні властивості

Термодинамічні властивості було розраховано на основі частот фононів з використанням статистичного термодинамічного підходу [24] на високоточній сітці вибірки у відповідній зоні Бріллюена. Залежність теплоємності за постійного об'єму (C_V) та ентропії (S) від температури показано на рис. 4 в порівнянні з доступними експериментальними даними C_V для алмазу [25]. Криві ентропії S зростають із температурою, як і очікується, оскільки збільшується невпорядкованість зі зростанням температури. Криві теплоємності

обох алотропів вказують на близьку, хоча і вищу подібність порівняно з експериментальними даними для алмазу. Отже, можна припустити наявність зв'язку між термодинамічними властивостями нових алотропів і алмазу.

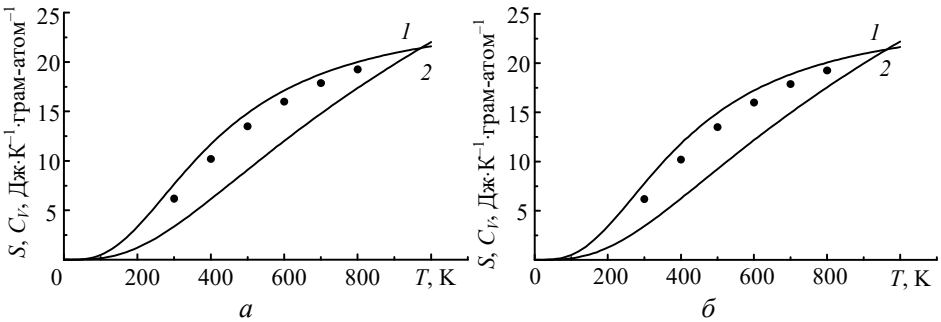


Рис. 4. Теплоємність за постійного об'єму (*1*) та ентропія (*2*) нових алотропів вуглецю – кубічного **ana** C_{48} (*а*) і тетрагонального **ukc** C_{32} (*б*), у порівнянні з алмазом; експериментальні дані теплоємності алмазу показано дискретними символами.

ЕЛЕКТРОННІ ЗОННІ СТРУКТУРИ

З використанням параметрів кристалів, наведених у табл. 1, було отримано електронні зонні структури для двох алотропів вуглецю за допомогою методу розширеної сферичної хвилі на основі теорії функціонала густини з урахуванням всіх електронів [23] та узагальненої градієнтної апроксимації функціонала обмінної кореляції [13]. У розрахунках враховували комірки з об'ємноцентрованою ґраткою.

Структури зон (рис. 5) розвиваються вздовж основних напрямків кубічної (див. рис. 5, *а*) і тетрагональної (див. рис. 5, *б*) зон Бріллюена. У вертикальному напрямку обидва алотропи мають енергетичну щілину, що відокремлює заповнену валентну зону від порожньої зони провідності, так що нульова енергія знаходиться відносно вершини валентної зони E_V. На рис. 5, *а* показано енергетичну щілину, що вказує на переважно ізолюючий характер C_{48} зі щілиною, більшою за 5 еВ і має прямий перехід між Γ_V і Γ_C. Навпаки, для C_{32} (див. рис. 5, *б*) спостерігали напівпровідникову поведінку з непрямою щілиною між Z_V і Γ_C. Такі електронні структури зон, що мають заборонені зони, супроводжуються особливостями, які були розглянуті вище під час аналізу зміни щільності заряду.

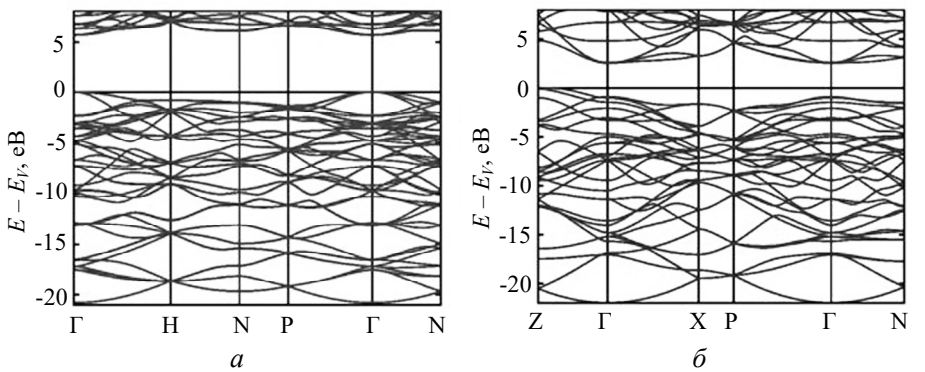


Рис. 5. Електронні зонні структури: C_{48} (*а*), C_{32} (*б*).

ВИСНОВКИ

На основі кристалохімії та квантово-механічних розрахунків кристалічних структур основного стану та відповідних фізичних властивостей запропоновано дві структури з високою стехіометрією і кубічною та тетрагональною симетрією, відповідно C_{48} та C_{32}. Кубічна структура C_{48} має найвищу симетрію просторової групи *Ia*-3 № 230 серед усіх тривимірних алотропів вуглецю, включаючи алмаз. Обидві структури ідентифіковано як деформовані тетраедри *C4* з відносно високою щільністю, що приводить до надтвердої механічної поведінки, яка випливає з їхніх пружних властивостей.

З погляду динаміки, C_{48} і C_{32} є стабільними з позитивними частотами, виявленими з їхніх фононних зонних структур. Найвищі (~ 40 ТГц) значення відповідають експериментальним результатам для алмазу, одержаним за методом Рамана. Електронні зонні структури показують, що C_{48} є переважно ізолятором, а C_{32} – напівпровідником.

Такі оригінальні алотропи з передбачуваними фізичними властивостями збагачують сферу досліджень вуглецю.

ФІНАНСУВАННЯ

Це дослідження не отримувало зовнішнього фінансування.

КОНФЛІКТ ІНТЕРЕСІВ

Автор заявляє про відсутність конфлікту інтересів.

S. F. Matar

Lebanese German University (LGU), Sahel-Alma, Jounieh, Lebanon

Novel high-symmetrical superhard C_{48} and C_{32} allotropes with original topologies: crystal engineering and DFT investigations

*Novel high symmetrical body centered carbon allotropes: cubic C_{48} and tetragonal C_{32} are proposed with respective original '**ana**' and '**ukc**' topologies. Devised from crystal structure engineering, their ground state structures and energy derived physical properties were accurately derived from quantum mechanics calculations within the density functional theory DFT. Both allotropes made of distorted tetrahedral C4 arrangements were found dense with $\rho > 3$ g/cm^3 that remains lower than diamond density:$\rho = 3.50$ g/cm^3. With cohesive albeit metastable ground state structures versus diamond, both allotropes show stability from the mechanical (elastic properties), dynamic (phonons band structures), as well as thermodynamic properties that show relationship with diamond's experimental $C_V = f(T)$ discrete results. Vickers hardness magnitudes $H_V(C_{48}) = 47$ GPa and $H_V(C_{32}) = 59$ GPa indicate superhard materials. The electronic band structures range from large direct band gap ~5 eV for C_{48} to indirect band gap ~2.5 eV of semi-conducting -like C_{32}. Such findings of original allotropes with targeted physical properties are bound to enrich the field of research on carbon allotropes especially highly symmetrical ones.*

***Keywords**: DFT; carbon allotropes; hardness; phonons; electronic structure.*

1. Zhang S., He J., Zhao Z., Yu D., Tian Y. Discovery of superhard materials via CALYPSO methodology. *Chinese Phys. B*. 2019. Vol. 28, art. 106104.
2. Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N. USPEX – Evolutionary crystal structure prediction. *Comput. Phys. Commun.* 2006. Vol. 175. P. 713–720.
3. Matar S.F. From layered 2D carbon to 3D tetrahedral allotropes C_{12} and C_{18} with physical properties related to diamond: Crystal chemistry and DFT investigations. *Prog. Solid State Chem*. 2024. Vol. 76, art. 100492.
4. Matar S.F. Superhard novel C_8 allotrope and derived subnitride C_6N_2 with cyclopropane-like C_3 building units. Crystal chemistry and first principles investigations. *J. Superhard Mater*. 2025. Vol. 47, no. 1. P. 1–8.

5. Matar S.F. High-density ultrahard novel orthorhombic carbon allotropes C_{12} and C_{16} with physical properties close to diamond: Structural and DFT investigations. *J. Superhard Mater*. 2025. Vol. 47, no. 3. P. 184–192.
6. Blatov V.A., Shevchenko A.P., Proserpio D.M. Applied topological analysis of crystal structures with the program package ToposPro. *Cryst. Growth Des*. 2014. Vol. 14. P. 3576–3586.
7. Matar S.F., Solozhenko V.L. First principles Search for novel ultrahard high-density carbon allotropes: hexagonal C_6, C_9, and C_{12}. *J. Superhard Mater*. 2023. Vol. 45. P. 239–248.
8. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev. B*. 1964. Vol. 136. P. 864–871.
9. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev. A*. 1965. Vol. 140. P. 1133–1138.
10. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 54, art. 11169.
11. Kresse G., Joubert J. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented wave. *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. P. 1758–1775.
12. Blöchl. P.E. Projector augmented wave method. *Phys. Rev. B*. 1994. Vol. 50. P. 17953–17979.
13. Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. The Generalized Gradient Approximation made simple. *Phys. Rev. Lett*. 1996. Vol. 77. P. 3865–3868.
14. Gaillac R., Pullumbi P., Coudert F.X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2016. Vol. 28, art. 275201.
15. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Annal. Phys*. 1889. Vol. 274. S. 573–587.
16. Tian Y., Xu B., Zhao Z. Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals. *Int. J. Refract. Met. Hard Mater*. 2012. Vol. 33. P. 93–106.
17. Chen X.-Q., Niu H., Li D., Li Y. Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses. *Intermetallics*. 2011. Vol. 19, art. 1275.
18. Togo A., Tanaka I. First principles phonon calculations in materials science. *Scr. Mater*. 2015. Vol. 108. P. 1–5.
19. Eyert V. The Augmented Spherical Wave Method: A Comprehensive Treatment (Lecture Notes in Physics 849). Springer, Berlin Heidelberg, 2012. 378 p.
20. Momma K., Izumi F. VESTA3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *J. Appl. Crystallogr*. 2011. Vol. 44. P. 1272–1276.
21. Brazhkin V.V., Solozhenko V.L. Myths about new ultrahard phases: why materials that are significantly superior to diamond in elastic moduli and hardness are impossible. *J. Appl. Phys*. 2019. Vol. 125, art. 130901.
22. Senkov O.N., Miracle D.B. Generalization of intrinsic ductile-to-brittle criteria by Pugh and Pettifor for materials with a cubic crystal structure. *Sci. Rep*. 2021. Vol. 11, art. 4531.
23. Krishnan R.S. Raman spectrum of diamond. *Nature*. 1945. Vol. 155, art. 171.
24. Dove M.T. *Introduction to lattice dynamics.* USA, New York: Cambridge University Press, 1993.
25. Victor A.C. Heat capacity of diamond at high temperatures. *J. Chem. Phys.* 1962. Vol. 36. P. 1903–1911.

Надійшла до редакції 11.09.25
Після доопрацювання 11.09.25
Прийнята до опублікування 16.09.25