Волинський національний університет
імені Лесі Українки

ФІЗИКА
ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Випуск 1

Видавничий дім
«Гельветика»
2024

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:

Мирончук Галина Леонідівна – доктор фізико-математичних наук, професор, директор навчально-наукового фізико-технологічного інституту Волинського національного університету імені Лесі Українки (головний редактор);

Галян Володимир Володимирович – доктор фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій Волинського національного університету імені Лесі Українки;

Головацький Володимир Анатолійович – доктор фізико-математичних наук професор, професор кафедри теоретичної фізики та комп'ютерного моделювання Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича;

Голодюк Лариса Степанівна – доктор педагогічних наук, доцент, заступник директора з науково-методичної діяльності КЗ «Кіровоградський обласний інститут післядипломної педагогічної освіти імені Василя Сухомлинського»;

Заболотний Володимир Федорович – доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри фізики і методики навчання фізики, астрономії Вінницького державного педагогічного університету імені Михайла Коцюбинського;

Кажукаускас Вайдотас – доктор фізико-математичних наук, професор, головний науковий співробітник групи дослідження фотоелектричних явищ Інституту фотоніки та нанотехнологій Вільнюського університету, м. Вільнюс, Литовська Республіка;

Кевшин Андрій Григорович – кандидат фізико-математичних наук, доцент, заступник директора з наукової роботи навчально-наукового фізико-технологічного інституту Волинського національного університету імені Лесі Українки;

Озга Катаржина – доктор наук, професор Ченстоховського політехнічного університету, м. Ченстохова, Республіка Польща;

Пясецький Міхал Войцех – доктор наук, професор Гуманітарно-природничого університету імені Яна Длугоша в Ченстохові, м. Ченстохова, Республіка Польща;

Рудиш Мирон Ярославович – кандидат фізико-математичних наук, доцент, старший науковий співробітник кафедри загальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка;

Савош Валентин Олексійович – кандидат педагогічних наук, завідувач відділу фізико-математичних дисциплін Волинського інституту післядипломної педагогічної освіти;

Сахнюк Василь Євгенович – кандидат фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського Волинського національного університету імені Лесі Українки;

Сільвейстр Анатолій Миколайович – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри фізики і методики навчання фізики, астрономії Вінницького державного педагогічного університету імені Михайла Коцюбинського;

Сосницька Наталія Леонідівна – доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри вищої математики і фізики Таврійського державного агротехнологічного університету імені Дмитра Моторного;

Трифонова Олена Михайлівна – доктор педагогічних наук, доцент, доцент доцент кафедри природничих наук та методик їхнього навчання Центральноукраїнського державного педагогічного університету імені Володимира Винниченка

Хижун Олег Юліанович – доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, завідувач відділу спектроскопії поверхні новітніх матеріалів Інституту проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича Національної академії наук України;

Шигорін Павло Павлович – кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського Волинського національного університету імені Лесі Українки;

Юхимчук Володимир Олександрович – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу оптики і спектроскопії напівпровідникових і діелектричних матеріалів Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова;

Яцюк Світлана Миколаївна – кандидат педагогічних наук, доцент, декан факультету інформаційних технологій і математики Волинського національного університету імені Лесі Українки.

Журнал ухвалено до друку Вченою радою
Волинського національного університету імені Лесі Українки
31 травня 2024 р., протокол № 7

Науковий журнал «Фізика та освітні технології»
зареєстровано Національною радою України з питань телебачення і радіомовлення
(Рішення № 1834 від 21.12.2023 року. Ідентифікатор медіа: R30-02336)

Суб'єкт у сфері друкованих медіа – Волинський національний університет імені Лесі Українки
(просп. Волі, буд. 13, м. Луцьк Волинської обл., 43025, post@vnu.edu.ua, тел. (0332) 720123).

Періодичність: 2 рази на рік.
Мови видання: українська, англійська, німецька, польська, іспанська, французька, болгарська.

«Фізика та освітні технології» включено до Переліку наукових фахових видань України категорії Б у галузі освіта/педагогіка (спеціальності 014 – Середня освіта (за предметними спеціальностями); 104 – Фізика та астрономія; 105 – Прикладна фізика та наноматеріали) відповідно до Наказу МОН України № 1290 від 30 листопада 2021 року (додаток 3); Наказу МОН України № 530 від 06 червня 2022 року (додаток 2).

Офіційний сайт видання: www.journals.vnu.volyn.ua/index.php/physics

Статті у виданні перевірені на наявність плагіату за допомогою програмного забезпечення StrikePlagiarism.com
від польської компанії Plagiat.pl.

ISSN 2786-5444 (print)
ISSN 2786-5452 (online)

© Волинський національний університет імені Лесі Українки, 2024

УДК 373.5.091.32:53+519]:37.011.2:613"364"
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-1

Василь ВЕЛИЧКО
студент 2-го курсу навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0009-0009-4502-2645*

Ніна ГОЛОВІНА
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-1152-1536*

Оксана ОСТРЕЙ
інженер з комп'ютерних систем ВТНЗ ЦІТКТ, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-1174-8367*

Наталія ПОЛІЩУК
студентка 2-го курсу навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0009-0001-6732-2501*

Бібліографічний опис статті: Величко, В., Головіна, Н., Острей, О., Поліщук, Н. (2024). Вивчення фізичних принципів військових дій як засіб формування здоров'язберігаючої компетентності. *Фізика та освітні технології,* 1, 3–16, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-1

ВИВЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ПРИНЦИПІВ ВІЙСЬКОВИХ ДІЙ ЯК ЗАСІБ ФОРМУВАННЯ ЗДОРОВ'ЯЗБЕРІГАЮЧОЇ КОМПЕТЕНТНОСТІ

Освіта відіграє ключову роль у розвитку суспільства. У період надзвичайних ситуацій саме освіта стає рушійною силою, що дозволяє давати адекватні відповіді на ці ситуації. Під час воєнних дій найважливішим завданням є виживання населення. Формування здоров'язберігаючої компетентності у школярів покладено на заклади освіти. Кожен педагог повинен при викладанні конкретної навчальної дисципліни приділяти максимальну увагу формуванню навичок самозбереження під час військових дій.

Вивчення фізичних принципів військових дій, таких як обстріли території нашої держави, формує розуміння про траєкторію, швидкість, дальність та час польоту ворожих засобів ураження. Вивчення фізичних принципів оповіщення повітряної тривоги дозволяє розробити алгоритми адекватної поведінки під час обстрілів.

Основи алгоритмічного мислення закладаються на уроках математики та інформатики ще у молодшій школі. Інформатика вивчає формування алгоритмів від повсякденних дій до програмування. Формування алгоритмів здоров'язберігаючих навичок у школярів під час воєнних дій може виступати змістовим навантаженням уроків інформатики. Авторами запропоновані методичні рекомендації з формування здоров'язберігаючої компетентності на уроках інформатики при розгляді завдань на військову тематику. Зокрема, надано рекомендації щодо проведення уроків з теми «Алгоритми» у молодшій та середній школі; запропоновано ряд компетентністних задач на військову тематику.

Вивчення фізичних принципів військових дій є змістовним навантаженням уроків фізики. Авторами надано методичні рекомендації з формування здоров'язберігаючої компетентності на уроках фізики при розв'язуванні задач на військову тематику. Зокрема, пояснено принципову різницю між рухом різних типів ракет, запропоновано задачі на визначення фізичних характеристик руху ворожих засобів ураження.

Надані методичні рекомендації можуть застосовуватися учителями інформатики та фізики для формування здоров'язберігаючої компетентності школярів.

Ключові слова: *здоров'язберігаючі компетентності; фізичні принципи військових дій; задачі на військову тематику з інформатики та фізики.*

Vasyl VELYCHKO
2nd-year student of the Educational and Scientific Physical and Technological Institute, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region,Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0009-0009-4502-2645*

Nina HOLOVINA
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID*: https://orcid.org/0000-0002-1152-1536*

Oksana OSTREI
Computer systems engineer of the Technical Teaching Aids Department of the "Center for Innovative Technologies and Computer Testing", Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-1174-8367*

Natalia POLISHCHUK
2nd-year student of the Educational and Scientific Physical and Technological Institute, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0009-0001-6732-2501*

To cite this article: Velychko, V., Holovina, N., Ostrei, O., Polishchuk, N. (2024). Vyvchennia fizychnykh pryntsypiv viiskovykh dii yak zasib formuvannia zdoroviazberihaiuchoi kompetentnosti [Study of the physical principles of military actions as a means of forming health-preserving competence]. *Physics and Educational Technology*, 1, 3–16, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-1

STUDY OF THE PHYSICAL PRINCIPLES OF MILITARY ACTIONS AS A MEANS OF FORMING HEALTH-PRESERVING COMPETENCE

Education plays a key role in the development of the society. During emergency situations, education becomes the driving force that allows us to provide adequate responses to these situations. During military operations, the most important task is the survival of the population. The formation of health-preserving competence among schoolchildren is entrusted to educational institutions. Each teacher should, when teaching a specific academic discipline, pay maximum attention to the formation of self-preservation skills during military operations.

Studying the physical principles of military actions, such as shelling the territory of our state, forms an understanding of the trajectory, speed, range and flight time of enemy weapons. The study of the physical principles of air warning allows the development of algorithms for adequate behavior during shelling.

The basics of algorithmic thinking are laid in mathematics and informatics lessons in junior high school. Computer science studies the formation of algorithms from everyday actions to programming. The formation of algorithms of health-preserving skills among schoolchildren during military operations can act as a content load of computer science lessons. The authors proposed methodological recommendations for the formation of health-preserving competence in computer science classes when considering tasks on military topics. In particular, recommendations have been made for conducting lessons on the topic "Algorithms" in junior high and high school; a number of competency-based tasks on military topics are proposed.

Studying the physical principles of military operations is a meaningful part of physics lessons. The authors provided methodical recommendations for the formation of health-preserving competence in physics lessons when solving military-related problems. In particular, the fundamental difference between the movement of different types of missiles is explained, and tasks for determining the physical characteristics of the movement of enemy weapons are proposed.

The provided methodological recommendations can be used by teachers of informatics and physics for the formation of health-preserving competence of schoolchildren.

Key words: *health-preserving competencies; physical principles of military operations; problems on military subjects in informatics and physics.*

Актуальність проблеми. Сучасні реалії України – війна проти російських загарбників. Воєнні дії несуть загрозу для кожного громадянина нашої держави. На законодавчому рівні під воєнними діями розуміють: «Воєнні дії – організоване застосування сил оборони та сил безпеки для виконання завдань з оборони України» (Верховна Рада України, 1991). В широкому розумінні: «Воєнні дії – організовані дії частин, з'єднань, об'єднань усіх видів збройних сил у ході виконання поставлених бойових завдань з метою знищення живої сили, бойової техніки, військових споруд і об'єктів противника, оволодіння територією, яку він займав, протидії наступу противника, відбиття його ударів і утримання займаної своїми військами території. Основними видами бойових дій є оборона і наступ. Їх ведуть у формі боїв, бойовищ, операцій, ударів у будь-який час року та доби на суходолі, у повітрі (космосі) та на морі». (Сидоров, 2022).

За Конституцією України (Верховна Рада України, 1996) Стаття 3: «Людина, її життя і здоров'я, честь і гідність, недоторканність і безпека визнаються в Україні найвищою соціальною цінністю». Тобто держава бере на себе зобов'язання реалізовувати політику безпечного існування кожної людини. Проте в умовах війни це реалізувати важко, тому важливо, щоб окрім держави про власну безпеку дбав кожен. Розуміння фізичних принципів військових дій для пересічного українця виступатиме засобом для формування власних навичок самозбереження і адекватної реакції на військові загрози. Сучасні реалії громадян нашої держави щоденно пов'язані за слідкуванням за сигналами оповіщення повітряної тривоги. На жаль, кількість жертв ракетних обстрілів свідчить про нехтуванням правил поведінки під час обстрілів. Це пов'язане з нерозумінням фізичних принципів оповіщення повітряної тривоги. Тому важливо проводити роз'яснювальну роботу, пояснюючи як діє оповіщення і скільки часу достатньо для шляху до укриття. На державному рівні роз'яснення дій населення під час військових дій відбувається через засоби масової інформації. Але діти, в силу психолого-вікових особливостей не цікавляться новинами. Тому первинне ознайомлення з правилами поведінки під час військових дій покладається на заклади освіти. Надати роз'яснення фізичних принципів оповіщення повітряної тривоги для дітей різних вікових категорій – актуальне завдання нашого сьогодення.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. За даними Global Coalition to Protect Education from Attack (GCPEA) (Anglade, Chapple, Rushing, 2023) у 2022 році по всьому світу відбулося понад 3 000 нападів на заклади освіти, що на 17% більше порівняно з попереднім роком. Коаліція GCPEA виявила, що у 2022 році зросла кількість випадків використання шкіл у військових цілях: було зареєстровано понад 500 випадків використання шкіл у військових цілях, і загалом понад 6000 учнів та педагогів були вбиті, поранені, викрадені, заарештовані або зазнали шкоди під час цих нападів – це на 20% більше, ніж у 2021 році. На жаль, напади на освіту відбуваються у великих масштабах. Мільйони дітей позбавлені можливості отримати освіту через напади на їхні школи.

Під час військових конфліктів, терор і насильство завдають психологічної шкоди кожній дитині, з потенційно серйозними наслідками для соціального та емоційного розвитку. Такі навички, як грамотність, лічба та критичне мислення затримуються через стресові ситуації і страждає когнітивний розвиток (Nicolai, Triplehorn, 2003). Тому функціонування системи освіти в умовах воєнного стану характеризується пошуком нових підходів до навчання, ефективних педагогічних рішень (Шкарлет, 2022).

Відповідно до Указу Президента України «Про введення воєнного стану в Україні» (Президент України, 2022), під час введення військового стану відбувається обмеження конституційних прав, зокрема, права на освіту, оскільки складно зберегти життя і здоров'я усіх учасників освітнього процесу: учнів, вчителів, студентів, викладачів. Під час військових конфліктів навчання, підготовка учнів та майбутніх фахівців втрачають свою якість та доступність. Освіта надає можливість і здатність трансформувати кожне нове покоління, має дуже важливе значення для суспільства, адже формує майбутніх спеціалістів, які в свою чергу перекриватимуть нестачу кадрів. Крім того, відсутність навчання в певний віковий період, який має назву «Сенситивний», перешкоджає

гармонійному розвитку особистості. Тому важливо, щоб доступ до освіти та її безперервність залишалися захищеними під час збройного конфлікту. Саме освіта сприяє формуванню у дітей здоров'язберігаючої компетентності та навичок самозбереження. Деякі з цих навичок уже закладені від народження, адже у світі майже немає істот, які ідуть на свідоме самознищення (виняток це самознищення для відтворення і захисту потомства).

У Державному стандарті (Кабінет Міністрів України, 2011) затверджено реалізацію компетентнісного підходу в сучасній освіті: «Компетентність – здатність виконувати різноманітні практичні завдання в житті та професійній діяльності на достатньому рівні, що зумовлено пізнавальними здібностями та навичками, соціальною взаємодією, мотивацією та волею». У школярів мають бути сформовані: мовна, інформаційна (цифрова), комунікаційна, культурологічна, екологічна, валеологічна (здоров'язбережувальна) та інші компетентності. Зупинимось детальніше на громадянських компетентностях, зокрема, здоров'язбережувальних, що розвивають здатність вести здоровий спосіб життя, дотримуватися безпечної поведінки та надавати першу допомогу. В умовах повномасштабного вторгнення РФ в Україну формування здоров'язбережувальної компетентності є стратегічним напрямом освітньої діяльності. Одним з аспектів здоров'язберігаючої компетентності є розвиток навичок самозбереження.

Державними органами розроблено ряд нормативних документів, які регламентують організацію навчального процесу під час війни (МОН України, 2017; Центр цивільного захисту та безпеки життєдіяльності Волинської обл., 2022; Відділ охорони праці ВНУ ім. Лесі Українки, 2022; Ректор ВНУ ім. Лесі Українки, 2022).

Автори статті у (Поліщук, Острей, 2023) розглянули фізичні принципи оповіщення повітряної тривоги; у (Величко, Острей, 2023) військову тематику при викладанні фізики та інформатики як спосіб усунення розриву між теоретичними та практичними знаннями; у (Величко, Острей, 2023) компетентнісні задачі на військову тематику.

Метою дослідження є: вивчення фізичних принципів військових дій як засобу формування здоров'язберігаючої компетентності.

Для розкриття мети слід виконати наступні **завдання**:

– розглянути нормативно-правові документи, що регламентують організацію безпечного освітнього середовища під час воєнних конфліктів;

– описати складові здоров'язберігаючої компетентності;

– надати методичні рекомендації з формування здоров'язберігаючої компетентності на уроках інформатики при розгляді завдань на військову тематику;

– надати методичні рекомендації з формування здоров'язберігаючої компетентності на уроках фізики при розв'язуванні задач на військову тематику.

Виклад основного матеріалу дослідження. Аналіз нормативно-правових документів, що регламентують організацію безпечного освітнього середовища під час воєнних конфліктів. Україна перебуває в стані збройної агресії протягом 10 років, для неперервного здобуття освіти розроблено ряд нормативних документів. Починаючи з 24.02.2022 під час повномасштабного вторгнення РФ в Україну освіта трансформувалася. Ще ковідні обмеження перевели її в дистанційний формат, проте результати та якість такого навчання значно погіршилися. У зв'язку з цим, постало питання про переведення дітей на змішану та очну форму навчання, а держава повинна забезпечити збереження життя усіх учасників освітнього процесу. Тому було розроблено ряд нормативних актів, для організації відносно безпечного середовища навчання. Сутність і загальний зміст яких, проілюстровано на ментальній карті (рис. 1). Відповідальність за організацію навчання покладається на органи місцевого самоврядування та керівників навчальних закладів, які зобов'язані провести інструктажі та відповідні навчання з усіма учасниками освітнього процесу, формуючи здоров'язберігаючу компетенцію дій під час військових конфліктів.

Формування здоров'язберігаючої компетентності у школярів. Відповідно до Державного стандарту, формування здоров'язберігаючої компетентності входить у кожну галузь навчання: «Мови і літератури», «Суспільствознавство», «Мистецтво», «Математика», «Природознавство», «Технології», «Здоров'я

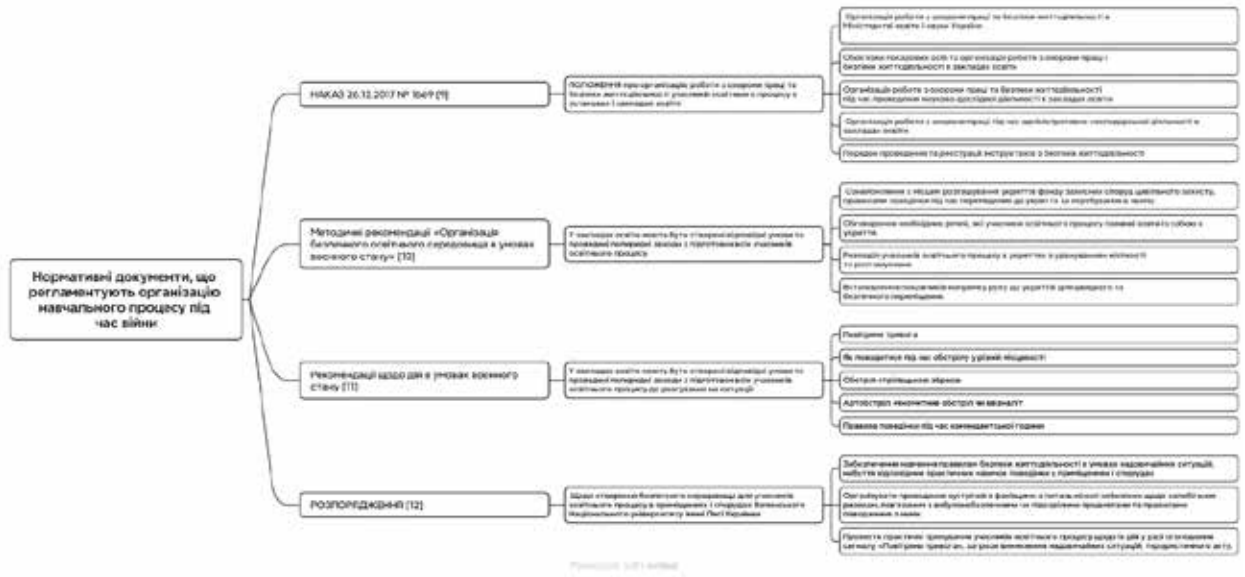


Рис. 1. Ментальна карта, що ілюструє перелік нормативних документів для організації відносно безпечного середовища навчання у ВНУ ім. Лесі Українки

і фізична культура». Галузь навчання «Здоров'я і фізична культура» є ключовою для розвитку здоров'язберігаючої компетентності. Основними шкільними предметами з цієї галузі є: основи здоров'я (1-9 клас), фізична культура (1-11клас), захист Вітчизни (10-11 клас). Але, відповідно до навчальних програм цих предметів (МОН України, 2017-2022), навички самозбереження під час воєнних дій розглядаються лише при вивченні предмету захист Вітчизни (10-11 клас). Тому важливо, щоб вчитель кожної навчальної дисципліни при викладанні власного предмету приділяв максимальну увагу здоров'язберігаючій компетентності, крім безпечної поведінки на власних уроках, необхідно розповідати про безпечну поведінку в сучасних реаліях повномасштабного вторгнення.

На ментальній карті (рис. 2) проілюстровано складові здоров'язбережувальної компетентності, які візуально продемонструють взаємозв'язок між різними елементами, відображають ключові аспекти здорового способу життя та стратегії підтримки здоров'я.

Кожен педагог повинен розкривати сутність тих чи інших військових явищ у своєму предметі. Вчителі хімії мають розглядати питання про хімічну зброю, використання фосфорних снарядів і захист від них, оскільки вони набагато ширше зможуть пояснити, ніж вчителі інших галузей навчання. Вчителі фізики повинні розглядати фізичні принципи повітряної тривоги, а також розглядати спеціалізовані задачі на військову тематику, використовуючи реальні технічні характеристики військових засобів. Вчителі інформатики, вивчаючи роботу з програмним забезпеченням як інструменту обробки інформації, змістовим навантаженням уроку можуть використати військову тематику.

Формування здоров'язберігаючої компетентності на уроках інформатики при розгляді завдань на військову тематику. Інформатика як навчальна дисципліна формує інформаційно-комунікаційну технологічну (ІКТ) компетентність (МОН України, 2017-2022). Здоров'язберігаюча компетентність розглядається при вивченні тем про правила поведінки з електронно-цифровими пристроями. Крім того, використовуючи змістове навантаження кожного уроку, можна формувати компетентності інших напрямків.

Теорія алгоритмів розглядається на уроках інформатики у 2-3 класі, при чому, якщо в 2-му класі розглядається ця тема тільки в розрізі поняття алгоритму і алгоритмічних дій, то починаючи з 3-го і вище класів пропонують написання алгоритмів у програмі Scratch. В 2-му класі можна запропонувати учням записати алгоритми дій при оголошенні повітряної тривоги та збору тривожної валізи простим словесним способом. При цьому, варто пояснити фізичні основи оповщення повітряної тривоги. А вже вивчаючи послідовні

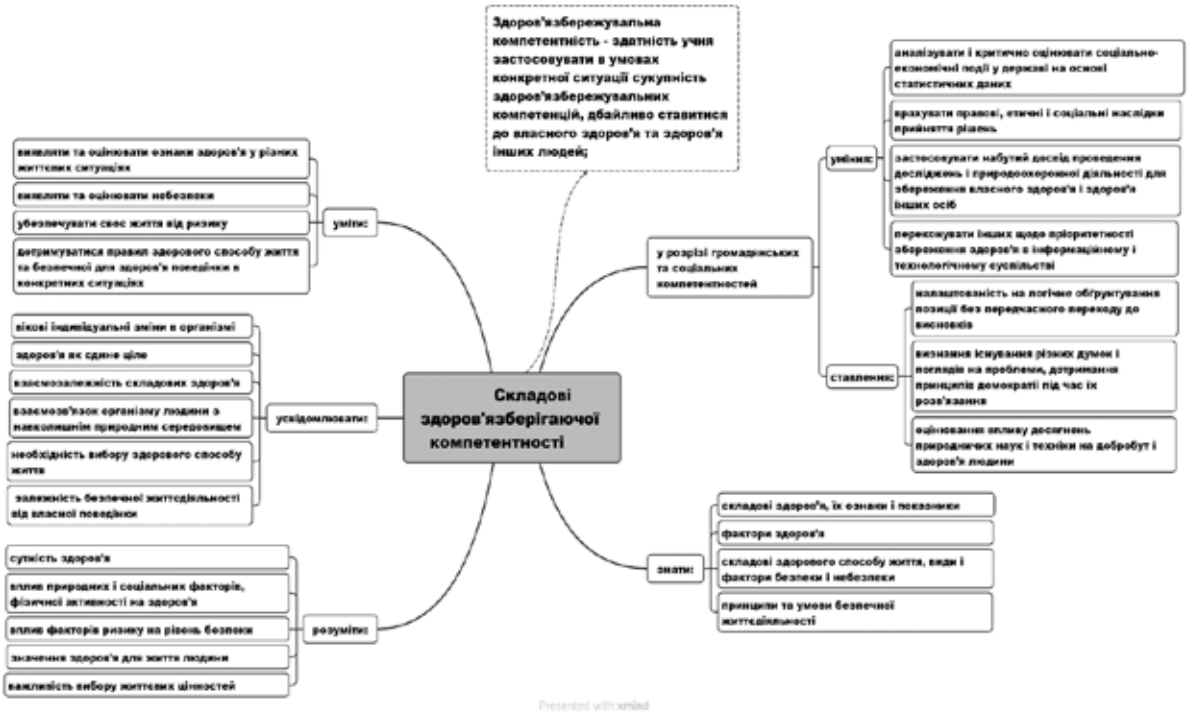


Рис. 2. Ментальна карта, що ілюструє сутність здоров'язберігаючої компетентності

а) дата 16.10.2023 [18]

б) дата 24.03.2024 [19]

Рис. 3. Приблизні маршрути різних типів ракет та безпілотників

алгоритми у Scratch можемо проілюструвати їх у вигляді програми. Ознайомлюючись з графічними можливостями Scratch варто проілюструвати рух ракет в повітряному просторі України (рис. 3). Методом аналогії пояснити принципову різницю руху балістичних та крилатих ракет (Долотова Д., 2024). Балістична ракета рухається як м'яч, кинутий під кутом до горизонту, траєкторія руху – парабола, спроєктована на горизонтальну поверхню карти є прямою лінією.

Принцип руху крилатої ракети ґрунтується на аеродинамічному русі – під дією підіймальної сили крила, вона може подолати більшу відстань, ніж балістична, може мати власний двигун, що дає можливість їй маневрувати (огинати перешкоди). Примітивною демонстрацією руху буде рух паперового літачка. Тобто крилата ракета летить, а балістична падає. Безпілотники (БПЛА) – літальні апарати без екіпажу на борту, керовані або людиною, або програмою рухаються складними траєкторіями. Приклад реалізації програми, створеної учнем 7 класу, подано на рисунках 4-5.

Компетентнісні задачі з інформатики на військову тематику. Розв'язування компетентнісних задач на військову тематику є засобом зацікавлення учнів різних класів до навчання; формує уміння використовувати набуті знання на практиці. Важливо розробити ряд

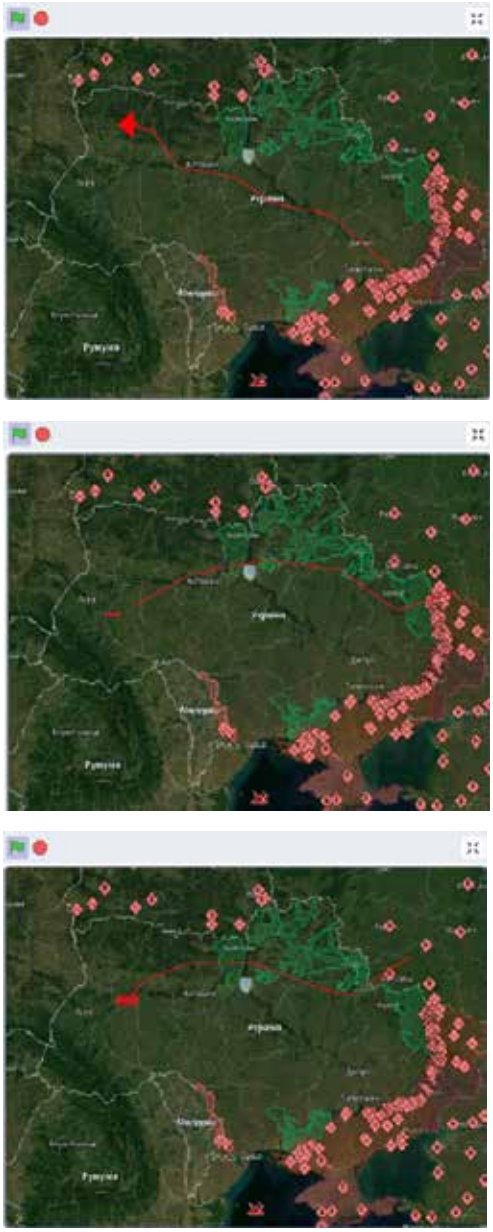


Рис. 4. Вигляд сцени навчального алгоритмічного середовища Scratch при виконанні програми «Імітація траєкторій різних типів озброєння, що використовує ворог при обстрілі України»

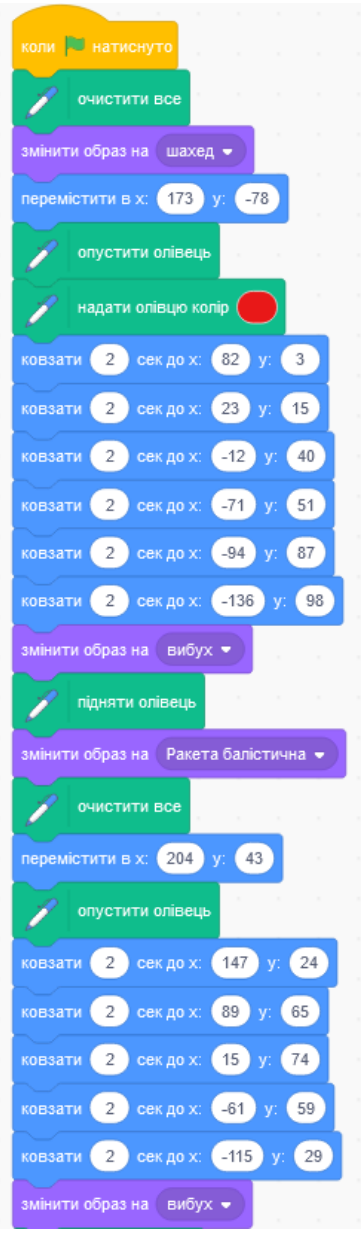


Рис. 5 Фрагмент скрипта програми «Імітація траєкторій різних типів озброєння, що використовує ворог при обстрілі України», створеної в навчальному алгоритмічному середовищі Scratch

актуальних для сьогодення задач, які б поглиблювали знання з одночасно різних предметів.

Розв'язування компетентнісних задач передбачається освітньою програмою "Інформатика" з 7 класу (МОН України, 2017). Такі задачі не обмежуються певною предметною галуззю (одним предметом), а передбачають застосування знань з кількох галузей (Ривкінд, 2015). Для розв'язку таких задач необхідне використання кількох інформаційних технологій.

Алгоритм розв'язку задач:

1. Виконати змістовий аналіз формулювання задачі з побудовою словесної інформаційної моделі (виділення з умови даних, необхідних для розв'язування задачі; вибір способу представлення кінцевих результатів).
2. Знайти необхідні відомості.
3. Вибрати засоби опрацювання даних.
4. Опрацювати дані.
5. Представити результати розв'язування задачі.

Таблиця 1

Відомості, які необхідні для розв'язування задачі

Характеристики озброєння, яке використовує	Україна		Росія	
	ОТРК "Сапсан" ("Грім-2") [23]	M142 HIMARS GLSDB[23]	2С-3 "Акація" [24]	2С-5 "Гіацинт-С"[24]
Дальність	500 км	150 км	24 км	33,1 км
Країна-виробник	Україна	США	Росія	Росія

Радіуси ураження для ОТРК "Грім-2" **Радіуси ураження для M142 HIMARS GLSDB**

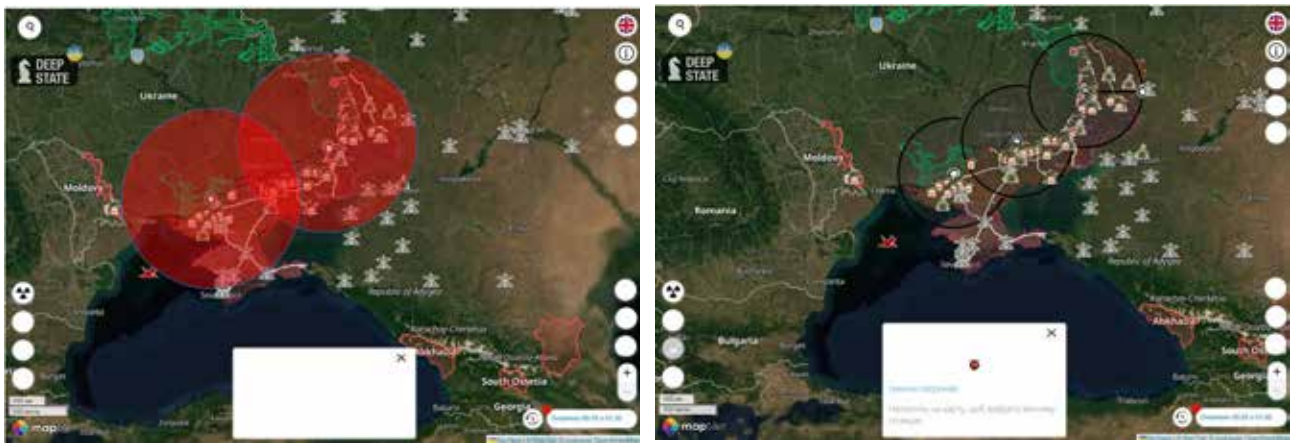


Рис. 6. Графічне представлення результату розв'язування задачі

Прикладом компетентнісної задачі на військову тематику є така задача:

Визначити радіус ураження противника ракетними комплексами: ОТРК "Грім-2", M142 HIMARS GLSDB та зобразити зони ураження по всій лінії фронту. Крім того врахувати, що дані ракетні комплекси не повинні розміщуватися в зоні ураження ворожої артилерії.

Відповідно до алгоритму:

1. Для розв'язку задачі необхідна інформація про: технічні характеристики ракетних комплексів, що використовуються Україною та ворогом, зокрема дальність польоту (виступатиме радіусом ураження), актуальну лінію фронту. Зображувати зони ураження зручно на карті бойових дій ресурсу deepstatemap (табл. 1) (DeepStateMAP, 2023).

2. Зобразимо зону ураження ракетних комплексів в графічному редакторі LibreOffice Draw, з врахуванням масштабу карти. Результат розв'язку задачі подамо у вигляді текстового документа, створеного в текстовому редакторі LibreOffice Writer з таблицею даних про характеристики ракетних комплексів та вставленим зображенням карти зони ураження (рис. 6).

Під час роботи над поданою задачею, варто акцентувати увагу на особливостях ракетних комплексів українського виробництва. Це виступатиме елементами національно-патріотичного виховання з формування почуття гордості за виробничі можливості України (Ткаченко, 2022): «"Грім-2" мав доволі цікаві характеристики – дальність враження оперативно-тактичними ракетами до 280 км, а у перспективі й до 500 км … як у російського "Іскандер-М". Це означає, що теоретично під прицілом тепер не тільки острів Зміїний, але й угрупування Чорноморського флоту у м. Севастополь».

Наведемо приклади компетентнісних задач, які можна запропонувати учням 8-11 класів для розв'язування на уроках інформатики, після вивчення роботи з відвідним програмним забезпеченням та теми «Механічний рух» з фізики.

Компетентнісна задача 1.
У мережі Інтернет знайти інформацію про конкретний тип ракети (за вказівкою вчителя), які застосовує РФ у війні проти України. Створити таблицю в табличному редакторі та вносити туди дані про технічні характеристики ракет. Визначити дальність польоту ракети з місця запуску до цілі, моделюючи рух на мапі (DeepStatemap, або Google map). Зробити знімок екрану, який потім додати до звіту розв'язаної задачі. Маючи дальність та швидкість польоту ракети визначити час руху ракети. Усі дані занести в документ текстового редактора.

Компетентнісна задача 2.
У мережі Інтернет знайти характеристики про російську «аналогов нєт» міжконтинентальну балістичну ракету Сармат. В табличному редакторі створити таблицю, куди внести дані про технічні характеристики цієї ракети. В Google maps виміряти дальність польоту ракети з місця запуску (Росія) до цілі (США) та зробити знімок екрану (для редагування використовувати графічний редактор типу LibreOffice Draw). Карту та дані про дальність також занести до таблиці. Знаючи дальність та швидкість польоту ракети, обчислити час польоту до цілі. Запропонувати найбезпечніші способи і місце знешкодження цієї ракети після запуску. Усі результати зберегти в документ текстового редактора.

При розв'язувані компетентнісних задач на військову тематику використовуються знання з різних галузей: фізика (дальність польоту = радіусу ураження = переміщенню); географія (робота з картами, масштаб); математика (радіус, масштаб); інформатика (практичне використання пошукових ресурсів, графічного редактора, текстового редактора). Крім того, задачі на військову тематику підвищують інтерес до навчання через актуалізацію проблем сьогодення, сприяють національно-патріотичному, морально-етичному вихованню через призму вивчення оборонно-технічних засобів власного виробництва та отриманих через міжнародну підтримку нашої держави.

Формування здоров'язберігаючої компетентності на уроках фізики при розв'язуванні задач на військову тематику. *Фізичні принципи оповіщення повітряної тривоги.* Повітряна тривога – сигнал оповіщення населення про загрозу атаки з повітря (Куницька Я., 2022). Вмикається у разі ризику авіаудару або запуску ракет у напрямку населеного пункту чи області. Оповіщення повітряної тривоги спрацьовує, коли радіолокаційні системи Повітряних сил ЗСУ фіксують переміщення ворожих літальних об'єктів у бік території України. За інформацією з радарів визначається напрям руху ракети з урахуванням того, що вона може змінити свій курс праворуч, ліворуч або навіть зникнути з радарів. На підставі цих даних у регіонах за траєкторією її польоту вмикається сигнал повітряної тривоги. При артилерійському обстрілі, ударах з РСЗВ "Град", "Смерч" сирена не спрацьовує через складність відстежити запуск таких снарядів. Орієнтовний час, який залежить від місця запуску ракети, швидкості її польоту та інших чинників. На рисунку 7 подано приблизні маршрути різних видів зброї, якими обстрілювали Україну: "Шахеди", "Балістична" та "Крилата".

Наголосимо на принциповій різниці цих ракет. Балістична ракета відрізняється тим, що підіймається високо, а потім за балістичною траєкторією падає на ціль. Одна з особливостей крилатої ракети – вона може подолати більшу відстань, ніж балістична, тобто ***одна летить, а інша падає.***

Розглянемо фізичні властивості руху ворожих ракет та дослідження конкретних дій учнів на сигнал оповіщення повітряної тривоги.

Визначимо час руху ворожої ракети від моменту запуску та час, за який має пересічна людина щоб дістатися укриття. Ця задача дає учням можливість дізнатися, які типи ракет використовує РФ проти України та показує важливість негайного реагування на сигнал повітряної тривоги задля збереження власного життя та здоров'я.

Таблиця 2

Приклад створеної таблиці до запропонованих компетентнісних задач

	С−300	**Кинджал**	**Х−101**	**Калібр**	**Х−22**	**Сармат**
Максимальна швидкість, км/год	4 680	14 688	900	864	4000	Сер. 18 000 – 25 200
Максимальна дальність, км	300	Міг−31К (2000) Ту−22М3 (>3000)	5 500	2 600	600	США – 16 000 Європа – 10 000
Тип	Балістика	Балістика	Крилата ракета	Крилата ракета	Крилата ракета	Міжконтинентальна ракета

Рис. 7. Приблизні маршрути різних видів зброї, якими обстрілювали Україну, згідно з даними [18]

З інформаційних джерел відомо, що літак на борту якого крилата ракета Х−22 злітає з аеродрому «Халіно», також відомо, що після 2 хвилин як злетів літак він запустив одну ракету на Житомир. Швидкість Х−22 – 4 265 км/год [26], відстань від місця запуску до цілі – 542 км [22]. Знайти час польоту ракети до цілі t_1 та час, який має пересічна людина, щоб добратися в укриття t_2. Вважати, що тривога оголошується відразу після зльоту літака з ракетами на борту, траєкторія ракети пряма.	
v = 4 265 км/год S = 542 км t = 2 хв t_1 – ? t_2 – ?	Відомо, що тривога оголошується відразу після зльоту літака з ракетами Х−22 на борту. Також відомо проміжок часу, через який було запущено одну ракету. За даними про відстань до цілі та швидкістю польоту ракети знайдемо час руху ракети. $t_1 = \frac{S}{v} = \frac{542}{4265} = 0{,}13$ год Визначимо час руху в хвилинах. 0,13 год * 60 хв=7,8 хв Знайдемо час, необхідний для пересічної людини, щоб добратися в укриття. $t_2 = t_1 + t = 7{,}8 + 2 = 9{,}8$ хв

Дана задача розглядає лише один з багатьох типів ракет, які застосовує РФ у збройній агресії проти України. Як приклад навчального проєкту з фізики, можна запропонувати дітям знайти технічні характеристики інших типів ракет, зобразити на карті приблизний маршрут їх руху та самостійно визначити час прильоту ракети з відповідного місця і час, який потрібен для того, щоб дістатися до укриття. Також варто розглянути практичну задачу: разом з усім класом заміряти час та визначити швидкість руху в укриття у разі повітряної тривоги. Проаналізувавши отриманні результати, визначити чи достатньо часу для того, щоб безпечно дістатися укриття при обстрілах різними типами ракет. Пояснити фізичні принципи оповіщення тривоги та обговорити алгоритм дій в конкретній ситуації військової загрози. Наголосити на важливості реагування на сигнал повітряної тривоги.

З інформаційних джерел [27] відомо, що Сармат – російський стратегічний ракетний комплекс п'ятого покоління шахтного базування, з важкою багатоступеневою рідинною міжконтинентальною балістичною ракетою (МБР). Швидкість – 25 000 км/год [13], відстань від місця запуску до цілі – 15 134 км. Проаналізувати технічні дані: довжина "Балістичної" ракети Сармат становить 35 м, стартова маса – 208 т, маса закидання – близько 10 т, дальність польоту ракети – 16 тис. км. За даними побудувати таблицю в текстовому редакторі, а також зобразити приблизний рух ракети на карті Google Maps, враховуючи дію магнітних полів Землі. Розрахувати швидкість прильоту снаряду t і площу території S_1, яка буде уражена під час та після авіаудару, вважати, що на 1 кг тротилу радіус ураження 2,7 м [28].	
v = 25 000 км/год ℓ = 15 134 км π = 3,14 t_1 – ? s_1 – ?	Знаючи швидкість та відстань від місця запуску до точки прильоту визначимо час за який ракета досягне цілі. $t = \frac{\ell}{v} = \frac{15134}{25000} = 0{,}6$ год Переведемо години в хвилини $t_1 = t \cdot 60 = 0{,}6 \cdot 60 = 36\,хв$ Визначимо площу ураження 1 кілограму тротилу. $s = \pi r^2 = 3{,}14 \cdot 2{,}7^2 = 4.8\,м^2$ Знаючи площу ураження 1 кілограму тротилу визначимо площу ураження ракети Сармат. $1m = 1000\,кг$ $10m = 10m \cdot 1000\,кг = 10 \cdot 10^3\,кг$ $s_1 = 10 \cdot 10^3 \cdot 4{,}8 = 48000\,м^2$

Змістовне наповнення уроків фізики задачами на військову тематику сприяє формуванню здоров'язберігаючої компетентності у школярів.

Рис. 8. Маршрут ракети Сармат до США у разі запуску

Таблиця 3

Приклад створеної таблиці до запропонованої задачі

	Маса	Швидкість	Дальність	Довжина
Сармат	280 т	25 000 км/год	16 000 тис. км	35 м

Висновки і перспективи подальших досліджень. Під час збройної агресії держава повинна переглянути принцип формування здоров'язберігаючих компетентностей у дітей. Необхідно приділяти більше уваги поясненню школярам правил збереження життя під час збройних конфліктів. Оскільки щотижневі виховні години не дозволяють приділити достатньо уваги питанню поведінки під час військових дій, тому кожен педагог повинен розкривати сутність тих чи інших військових явищ у своєму предметі.

Компетентністний підхід в освіті сприяє формуванню конкретних навичок та здібностей учнів і розвиває їхню самостійність, критичне мислення та здатність до розв'язання конкретних життєвих проблем, таких як збереження власного життя та здоров'я під час військових дій.

Інформатика має широкі можливості для формування здоров'язберігаючої компетентності уже в молодших школярів. Підібрано ряд змістових завдань на військову тематику, які використовуються при вивченні різних тем: текстовий редактор, редактор презентацій, табличний редактор, бази даних. Таким чином, через змістове навантаження можна розвинути не лише ІКТ навички, а також здоров'язберігаючі компетентності. У сучасному викладанні варто пояснювати учням дані речі як життєво необхідні знання.

Уроки фізики сприяють формуванню здоров'язберігаючої компетентності, оскільки дають можливість пояснити фізичну суть військового явища: оповіщення повітряної тривоги, ракетних та артилерійських обстрілів, небезпеки від безпілотних літальних апаратів тощо. Отже, вивчення фізичних принципів військових дій є змістовним навантаженням уроків фізики.

Лише спільними зусиллями усіх учасників освітнього процесу можна комплексно сформувати здоров'язберігаючу компетентність і розвинути навички самозбереження під час військового стану.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Про оборону України : Закон України від 06 грудня 1991 р. № 1932-XII / Верховна Рада України. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1932-12#Text (дата звернення: 28.03.2024).

2. Сидоров С. В. Бойові дії. *Велика українська енциклопедія*. URL: https://vue.gov.ua/Бойові дії (дата звернення: 28.03.2024).

3. Конституція України : Закон України від 28.06.1996 № 254к/96-ВР зі змінами № 2222-IV від 08.12.2004, ВВР, 2005, № 2, ст.44. / Верховна Рада України. *Відомості Верховної Ради України*. 1996.

4. Anglade M., Chapple M., Rushing E. Protecting education from attack during armed conflict. *Humanitarian Law & Policy Blog*. URL: https://blogs.icrc.org/law-and-policy/2023/09/13/protecting-education-from-attack-during-armed-conflict/ (date of access: 12.03.2024).

5. Nicolai S., Triplehorn C. The Role of Education in Protecting Children in Conflict. London, 2003. 36 s. URL: https://www.files.ethz.ch/isn/96795/networkpaper042.pdf (дата звернення: 19.03.2024).

6. Освіта України в умовах воєнного стану. Інноваційна та проєктна діяльність: Науково-методичний збірник/ за загальною ред. С. М. Шкарлета. Київ-Чернівці: Букрек, 2022. 140 с. URL: mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/serpneva-konferencia/2022/Mizhn.serpn.ped.nauk-prakt.konferentsiya/Nauk-metod.zbirnyk-Osv.Ukrayiny.v.umovakh.voyennoho.stanu-%20Innovatsiyna.ta.proyektna.diyalnist.pdf (дата звернення: 19.03.2024).

7. Про введення воєнного стану в Україні : Указ Президента України. *Офіційний вебпортал парламенту України*. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/64/2022#Text (дата звернення: 12.03.2024).

8. Про затвердження Державного стандарту базової і повної загальної середньої освіти : Постанова Кабінету Міністрів України. *Офіційний вебпортал парламенту України*. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1392-2011-п#Text (дата звернення: 12.03.2024).

9. Про затвердження Положення про організацію роботи з охорони праці та безпеки життєдіяльності учасників освітнього процесу в установах і закладах освіти : Наказ Міністерства освіти і науки України 26.12.2017. № 1669. *Офіційний вебпортал парламенту України*. URL: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0100-18#Text (дата звернення: 17.03.2024).

10. Організація безпечного освітнього середовища в умовах воєнного стану / Методичні рекомендації / укладачі О.М. Грушевенчук та ін. Луцьк : *Навчально-методичний центр цивільного захисту та безпеки життєдіяльності Волинської області,* 2022. 49с.

11. Щодо дій в умовах воєнного стану / Рекомендації відділу охорони праці ВНУ імені Лесі Українки від 31.08.2022 р.

12. Щодо створення безпечного середовища для учасників освітнього процесу в приміщеннях і спорудах Волинського Національного університету імені Лесі Українки / Розпорядження ректора Волинського Національного університету імені Лесі Українки від 20.09.2022 р. № 22.

13. Поліщук Н., Острей О. Фізичні принципи оповіщення повітряної тривоги. Актуальні проблеми розвитку природничих та гуманітарних наук :збірник матеріалів VII Міжнар. наук. практ. конф. м. Луцьк, 10 листопада 2023р. Луцьк, 2023. 573 с. С. 154-156

14. Величко В., Острей О. Військова тематика при викладанні фізики та інформатики як спосіб усунення розриву між теоретичними та практичними знаннями. *Актуальні проблеми розвитку природничих та гуманітарних наук* : збірник матеріалів VII Міжнар. наук. практ. конф. м. Луцьк, 10 листопада 2023р. Луцьк, 2023. 573 с. С. 144-146.

15. Величко В.О., Острей О.Р. Компетентнісні задачі на військову тематику. *Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень: м*атеріали XVII Міжнародної науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених Луцьк, 16−17 травня 2023 року. Луцьк: ВНУ ім. Лесі Українки, 2023. С. 862-865.

16. Освітні програми. *МОН України*. URL: https://mon.gov.ua/ua/osvita/
zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi (дата звернення: 19.03.2024).

17. Долотова Д. Чим відрізняється балістична ракета від крилатої. 2024. *Vikna.TV.* URL: https://vikna.tv/dlia-tebe/bezpeka/chym-vidriznyayetsya-balistychna-raketa-vid-krylatoyi/ (дата звернення: 27.03.2024).

18. Комбінована атака у складних погодних умовах. Маршрути ракет й "шахедів" 16 жовтня (карта). URL: https://texty.org.ua/fragments/110886/kombinovana-ataka-u-skladnyh-pohodnyh-umovah-marshruty-raket-j-shahediv-16-zhovtnya-karta/ (дата звернення: 21.10.2023).

19. Приблизний підсумок руху повітряних цілей за 22.03.2024, 2024. *monitoringwar*. URL: https://uk.tgstat.com/en/channel/@monitoringwar.

20. Програма курсу. Інформатика. *МОН України* URL: https://mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/programy-5-9-klas/onovlennya-12-2017/programa-informatika-5-9-traven-2015.pdf (дата звернення: 16.03.2023).

21. Інформатика : підруч. для 7-го кл. загальноосвіт. навч. закл. / Й. Я. Ривкінд та ін. Київ : Генеза, 2015. 240 с.

22. DeepStateMAP. *Map of the war in Ukraine*. URL: https://deepstatemap.live/en#7/45.522/31.223 (date of access: 16.03.2023).

23. Ткаченко В. ОТРК Грім-2 – технічні характеристики та радіус ураження. *Факти ICTV*. URL: https://fakty.com.ua/ua/ukraine/polituka/20220701-potuzhnyj-ta-bagatofunkczionalnyj-na-shho-zdatnyj-ukrayinskyj-otrk-grim-2/ (дата звернення: 16.03.2023).

24. Даценко В. У Росії в п'ять разів більше артилерії, але в України тепер є MLRS, здатні бити в тил. Важка зброя НАТО може змінити війну. *Forbes.ua*. URL: https://forbes.ua/inside/u-rosii-v-pyat-raziv-bilshe-artilerii-ale-v-

ukraini-teper-e-mlrs-zdatni-biti-v-til-yak-vazhka-zbroya-nato-mozhe-zminiti-viynu-11072022-7098 (дата звернення: 16.03.2023).

25. Куницька Я. За яким принципом вмикаються системи оповіщення і як спрацьовує повітряна тривога в Україні. НСН Україна. 2022. URL: https://nikopolnews.net/ukraina/janina-za-iakym-pryntsypom-vmykaiutsia-systemy-opovishchennia-i-iak-spratsovuie-povitriana-tryvoha-v-ukraini/ (дата звернення: 21.10.2023).

26. Одінцова А. У кілька разів швидша за звук. Що відомо про ракети Х-22, однією з яких росіяни вбили десятки людей у будинку в Дніпрі. [Several times faster than sound. What is known about the Kh-22 missiles, one of which the Russians killed dozens of people in a house in Dnipro] New Voice. URL: https://nv.ua/ukraine/events/raketa-h-22-harakteristiki-skorost-dalnost-modifikacii-i-vysota-primeneniya-chto-izvestno-50297756.html (дата звернення: 17.03.2024).

27. Ткаченко В. Російська міжконтинентальна балістична ракета Сармат: на що здатна та характеристики. 2024. Факти ICTV. URL: https://fakty.com.ua/ua/ukraine/suspilstvo/20240229-raketa-sarmat-harakterystyky/ (дата звернення: 31.03.2024).

28. До чого призводить вибух тротилу. Інфографіка. ТСН.ua. URL: https://tsn.ua/ru/nauka_it/k-chemu-privodit-vzryv-trotila-infografika-527134.html (дата звернення: 31.03.2024).

REFERENCES:

1. Pro oboronu Ukrainy [About the defense of Ukraine] : Zakon Ukrainy vid 06 hrudnia 1991 r. № 1932-XII / Verkhovna Rada Ukrainy. Retrieved from: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1932-12#Text (date of access: 28.03.2024) [in Ukrainian].

2. Sydorov, S.V. Boiovi dii [Combat actions]. *Velyka ukrainska entsyklopediia*. Retrieved from: https://vue.gov.ua/Boiovi dii (date of access: 28.03.2024) [in Ukrainian].

3. Konstytutsiia Ukrainy [Constitution of Ukraine] : Zakon Ukrainy vid 28.06.1996 № 254k/96-VR zi zminamy № 2222-IV vid 08.12.2004, VVR, 2005, № 2, st.44. / Verkhovna Rada Ukrainy. Vidomosti Verkhovnoi Rady Ukrainy. 1996 [in Ukrainian].

4. Anglade, M., Chapple, M., & Rushing, E. Protecting education from attack during armed conflict. Humanitarian Law & Policy Blog. Retrieved from: https://blogs.icrc.org/law-and-policy/2023/09/13/protecting-education-from-attack-during-armed-conflict/ (date of access: 12.03.2024).

5. Nicolai, S., & Triplehorn, C. (2003). The Role of Education in Protecting Children in Conflict. London, 36 s. Retrieved from: https://www.files.ethz.ch/isn/96795/networkpaper042.pdf (date of access: 19.03.2024).

6. Osvita Ukrainy v umovakh voiennoho stanu. Innovatsiina ta proiektna diialnist (2022). [Education of Ukraine under martial law. Innovative and project activities]: *Naukovo-metodychnyi zbirnyk*/ za zahalnoiu red. S. M. Shkarleta. Kyiv-Chernivtsi: Bukrek, 140 s. Retrieved from: mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/serpneva-konferencia/2022/Mizhn.serpn.ped.nauk-prakt.konferentsiya/Nauk-metod.zbirnyk-Osv.Ukrayiny.v.umovakh.voyennoho.stanu-%20Innovatsiyna.ta.proyektna.diyalnist.pdf (date of access: 19.03.2024). [in Ukrainian].

7. Pro vvedennia voiennoho stanu v Ukraini [About the introduction of martial law in Ukraine]: Ukaz Prezydenta Ukrainy. Ofitsiinyi vebportal parlamentu Ukrainy. Retrieved from: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/64/2022#Text (date of access: 12.03.2024) [in Ukrainian].

8. Pro zatverdzhennia Derzhavnoho standartu bazovoi i povnoi zahalnoi serednoi osvity [On the approval of the State standard of basic and complete general secondary education]: Postanova Kabinetu Ministriv Ukrainy. Ofitsiinyi vebportal parlamentu Ukrainy. Retrieved from: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/1392-2011-p#Text (date of access: 12.03.2024) [in Ukrainian].

9. Pro zatverdzhennia Polozhennia pro orhanizatsiiu roboty z okhorony pratsi ta bezpeky zhyttiediialnosti uchasnykiv osvitnoho protsesu v ustanovakh i zakladakh osvity [On the approval of the Regulation on the organization of work on labor protection and life safety of participants in the educational process in institutions and educational institutions] : Nakaz Ministerstva osvity i nauky Ukrainy 26.12.2017. № 1669. *Ofitsiinyi vebportal parlamentu Ukrainy*. Retrieved from: https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z0100-18#Text (date of access: 17.03.2024) [in Ukrainian].

10. Orhanizatsiia bezpechnoho osvitnoho seredovyshcha v umovakh voiennoho stanu (2022). [Organization of a safe educational environment under martial law] / Metodychni rekomendatsii / ukladachi O.M. Hrushevenchuk ta in. Lutsk : Navchalno-metodychnyi tsentr tsyvilnoho zakhystu ta bezpeky zhyttiediialnosti Volynskoi oblasti, 49s [in Ukrainian].

11. Shchodo dii v umovakh voiennoho stanu [Regarding actions under martial law] / Rekomendatsii viddilu okhorony pratsi VNU imeni Lesi Ukrainky vid 31.08.2022 r [in Ukrainian].

12. Shchodo stvorennia bezpechnoho seredovyshcha dlia uchasnykiv osvitnoho protsesu v prymishchenniakh i sporudakh Volynskoho Natsionalnoho universytetu imeni Lesi Ukrainky [Regarding the creation of a safe environment for participants in the educational process in the premises and buildings of Lesya Ukrainka Volyn National

University] / Rozporiadzhennia rektora Volynskoho Natsionalnoho universytetu imeni Lesi Ukrainky vid 20.09.2022 r. № 22. [in Ukrainian].

13. Polishchuk, N., & Ostrei, O. (2023). Fizychni pryntsypy opovishchennia povitrianoi tryvohy [Physical principles of air alarm notification]. *Aktualni problemy rozvytku pryrodnychykh ta humanitarnykh nauk* :zbirnyk materialiv VII Mizhnar. nauk. prakt. konf. m. Lutsk, 10 lystopada 2023r. Lutsk, 573 s. S. 154–156 [in Ukrainian].

14. Velychko, V., & Ostrei, O. (2023). Viiskova tematyka pry vykladanni fizyky ta informatyky yak sposib usunennia rozryvu mizh teoretychnymy ta praktychnymy znanniamy [Military topics in the teaching of physics and computer science as a way to eliminate the gap between theoretical and practical knowledge]. *Aktualni problemy rozvytku pryrodnychykh ta humanitarnykh nauk* : zbirnyk materialiv VII Mizhnar. nauk. prakt. konf. m. Lutsk, 10 lystopada 2023r. Lutsk, 573 s. S.144–146 [in Ukrainian].

15. Velychko, V.O., & Ostrei, O.R. (2023). Kompetentnisni zadachi na viiskovu tematyku [Competence tasks on military topics]. Moloda nauka Volyni: priorytety ta perspektyvy doslidzhen: materialy KhVII Mizhnarodnoi naukovo-praktychnoi konferentsii studentiv, aspirantiv ta molodykh vchenykh Lutsk, 16−17 travnia 2023 roku. Lutsk: VNU im. Lesi Ukrainky, S. 862–865 [in Ukrainian].

16. Osvitni prohramy [Educational programs] MON Ukrainy. Retrieved from: https://mon.gov.ua/ua/osvita/zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi (date of access: 19.03.2024) [in Ukrainian].

17. Dolotova, D. (2024). Chym vidrizniaietsia balistychna raketa vid krylatoi. [What is the difference between a ballistic missile and a cruise missile] Vikna.TV. Retrieved from https://vikna.tv/dlia-tebe/bezpeka/chym-vidriznyayetsya-balistychna-raketa-vid-krylatoyi/ (date of access: 27.03.2024) [in Ukrainian].

18. Kombinovana ataka u skladnykh pohodnykh umovakh. Marshruty raket y "shakhediv" 16 zhovtnia (karta) [Combined attack in difficult weather conditions. Routes of rockets and "shaheeds" on October 16 (map).] Retrieved from: https://texty.org.ua/fragments/110886/kombinovana-ataka-u-skladnyh-pohodnyh-umovah-marshruty-raket-j-shahediv-16-zhovtnya-karta/ (date of access: 21.10.2023). [in Ukrainian].

19. Pryblyznyi pidsumok rukhu povitrianykh tsilei za 22.03.2024, 2024 [Approximate summary of the movement of air targets for March 22, 2024]. monitoringwar. Retrieved from: https://uk.tgstat.com/en/channel/@monitoringwar. [in Ukrainian].

20. Prohrama kursu. Informatyka. [Course program. Computer Science] MON Ukrainy Retrieved from: https://mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/programy-5-9-klas/onovlennya-12-2017/programa-informatika-5-9-traven-2015.pdf (date of access: 16.03.2023) [in Ukrainian].

21. Informatyka : pidruch. dlia 7-ho kl. zahalnoosvit. navch. zakl. (2015). [Informatics: subclass. for the 7th grade general education education closing]/ Y. Ya. Ryvkind ta in. Kyiv : Heneza, 240 s. [in Ukrainian].

22. DeepStateMAP. Map of the war in Ukraine. Retrieved from: https://deepstatemap.live/en#7/45.522/31.223 (date of access: 16.03.2023).

23. Tkachenko, V. OTRK Hrim-2 – tekhnichni kharakterystyky ta radius urazhennia [OTRK Grim-2 – technical characteristics and radius of damage] Fakty ICTV. Retrieved from: https://fakty.com.ua/ua/ukraine/polituka/20220701-potuzhnyj-ta-bagatofunkczionalnyj-na-shho-zdatnyj-ukrayinskyj-otrk-grim-2/ (date of access: 16.03.2023) [in Ukrainian].

24. Datsenko, V. U Rosii v piat raziv bilshe artylerii, ale v Ukrainy teper ye MLRS, zdatni byty v tyl. Vazhka zbroia NATO mozhe zminyty viinu. [Russia has five times more artillery, but Ukraine now has MLRS capable of hitting the rear. NATO heavy weapons can change the war.] Forbes.ua. Retrieved from: https://forbes.ua/inside/u-rosii-v-pyat-raziv-bilshe-artilerii-ale-v-ukraini-teper-e-mlrs-zdatni-biti-v-til-yak-vazhka-zbroya-nato-mozhe-zminiti-viynu-11072022-7098 (date of access: 16.03.2023) [in Ukrainian].

25. Kunytska, Ya. (2022). Za yakym pryntsypom vmykaiutsia systemy opovishchennia i yak spratsovuie povitriana tryvoha v Ukraini [By what principle are warning systems turned on and how does an aerial alarm work in Ukraine]. NSN Ukraina. Retrieved from: https://nikopolnews.net/ukraina/janina-za-iakym-pryntsypom-vmykaiutsia-systemy-opovishchennia-i-iak-spratsovuie-povitriana-tryvoha-v-ukraini/ (date of access: 21.10.2023) [in Ukrainian].

26. Odintsova, A. U kilka raziv shvydsha za zvuk. Shcho vidomo pro rakety Kh-22, odniieiu z yakykh rosiiany vbyly desiatky liudei u budynku v Dnipri neskolko raz выstree zvuka. New Voice. Retrieved from: https://nv.ua/ukraine/events/raketa-h-22-harakteristiki-skorost-dalnost-modifikacii-i-vysota-primeneniya-chto-izvestno-50297756.html (date of access: 17.03.2024) [in Ukrainian].

27. Tkachenko, V. Rosiiska mizhkontynentalna balistychna raketa Sarmat: na shcho zdatna ta kharakterystyky (2024). [Russian intercontinental ballistic missile Sarmat: what it is capable of and characteristics]. Fakty ICTV. Retrieved from: https://fakty.com.ua/ua/ukraine/suspilstvo/20240229-raketa-sarmat-harakterystyky/ (date of access: 31.03.2024) [in Ukrainian].

28. Do choho pryzvodyt vybukh trotylu. Infohrafika [What causes a TNT explosion. Infographics] TSN.ua. Retrieved from: https://tsn.ua/ru/nauka_it/k-chemu-privodit-vzryv-trotila-infografika-527134.html (date of access: 31.03.2024) [in Ukrainian].`

УДК 621.315.592
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-2

Оксана ЗАМУРУЄВА
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл.,Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-0032-0613*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 56181742100*

Василь САХНЮК
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл.,Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9225-7473*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 13405019700*

Юрій ІВАНОВСЬКИЙ
студент Навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

Андрій ФЛЯК
студент Навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

Бібліографічний опис статті: Замуруєва, О., Сахнюк, В., Івановський, Ю., Фляк, А. (2024). Властивості перспективних композитів для оптоелектронної техніки. *Фізика та освітні технології,* 1, 17–24, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-2

ВЛАСТИВОСТІ ПЕРСПЕКТИВНИХ КОМПОЗИТІВ ДЛЯ ОПТОЕЛЕКТРОННОЇ ТЕХНІКИ

Мета роботи провести аналіз властивостей перспективних композитів з шаруватою структурою для оптоелектронної техніки. Визначити особливості змін параметрів при зміні компонентів.

Оцінено ширину забороненої зони. Установлено залежність зміни ширини забороненої зони від температури й компонентного вмісту досліджуваних сполук. На основі аналізу частотної залежності коефіцієнта поглинання та фотопровідності запропоновано модель оптичних переходів, яка пояснює зв'язок домішкових максимумів спектрів фотопровідності із відповідними структурними дефектами.

Проаналізовано залежність ширини енергетичних щілин для прямого (H) і непрямого (Z) мінімумів зони провідності від вмісту $E_g = f(x)$ $SiSe_2$, $GeSe_2$. *Схематично пкзано енергетична зонна структура* $Tl_{1-x}In_{1-x}(Si, Ge)_xSe_2$.

Отже, напівпровідникові кристали твердих розчинів $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – *Si, Ge), ширина забороненої зони яких при кімнатній температурі 1,12 ÷ 1,69 еВ, є перспективними в якості функціональних матеріалів сучасної оптоелектронної техніки, для застосування у фотоніці та фотовольтаїці. Зміна фізичних властивостей від молярного вмісту компонент x, пов'язаних з перебудовою зонної структури, значно розширює функціональні можливості кристалічних сполуках* $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – *Si, Ge).*

В статті встановлено при температурі T = 300 K основні фотонні параметри кристалів твердих розчинів $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ *від молярного вмісту* $SiSe_2$, $GeSe_2$, *в якості використання як функціональних матеріалів для оптоелектронних пристроїв. Тому маючи добре налагодженні технології одержання кристалічних сполук можна одержувати багатофункціональні матеріали для оптоелектронних пристроїв. Зміною молярного вмісту компонент x можна прогнозовано змінювати механізми міжзонних переходів напівпровідників, що розширює практичне використання матеріалу для світло- чи фотопристроїв.*

Ключові слова: *напівпровідник, германій, кремній, багатокомпонентні сполуки, ширина забороненої зони.*

Oksana ZAMURUIEVA
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Theoretical and Computer Physics named by A. V. Svidzynskyi, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-0032-0613*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 56181742100*

Vasily SAKHNYUK
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Theoretical and Computer Physics named by A. V. Svidzynskyi, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9225-7473*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 13405019700*

Yurii IVANOVSYI
Student of the Department of Theoretical and Computer Physics named by A. V. Svidzynskyi, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

Andrew FLIAK
Student of the Department of Theoretical and Computer Physics named by A. V. Svidzynskyi, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

To cite this article: Zamuruieva, O., Sakhnyuk, V., Ivanovsyi, Y, Fliak, A. (2024). Vlastyvosti perspektyvnykh kompozytiv dlia optoelektronnoi tekhniky [Properties of promising prospective composites for optoelectronic]. *Фізика та освітні технології, 1*, 17–24, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-2

PROPERTIES OF PROMISING PROSPECTIVE COMPOSITES FOR OPTOELECTRONIC

The purpose of the work is to analyze the properties of promising composites with a layered structure for optoelectronic technology. Determine the features of parameter changes when changing components.

The width of the forbidden band is estimated. The dependence of the band gap change on temperature and the component content of the studied compounds was established. Based on the analysis of the frequency dependence of the absorption coefficient and photoconductivity, a model of optical transitions is proposed, which explains the connection of the home maxima of the photoconductivity spectra with the corresponding structural defects.

The dependence of the width of the energy gaps for the direct (H) and indirect (Z) minima of the conduction band on the content of $SiSe_2$, $GeSe_2$ was analyzed. The energy band structure of $Tl_{1-x}In_{1-x}(Si, Ge)_xSe_2$ was schematically plotted.

Therefore, semiconductor crystals of $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV}–Si, Ge) solid solutions, whose band gap at room temperature is 1.12–1.69 eV, are promising as functional materials of modern optoelectronic technology, for use in photonics and photovoltaics. The change in physical properties from the molar content of components x, associated with the rearrangement of the band structure, significantly expands the functionality of crystalline compounds $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – Si, Ge).

In the article, the basic photonic parameters of $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ solid solution crystals from the molar content of $SiSe_2$, $GeSe_2$, as functional materials for optoelectronic devices, were established at a temperature of T = 300 K. Therefore, having well-established technologies for obtaining crystalline compounds, it is possible to obtain multifunctional materials for optoelectronic devices. By changing the molar content of components x, it is possible to predictably change the mechanisms of interband transitions of semiconductors, which expands the practical use of the material for light or photo devices.

Key words: *semiconductor, germanium, silicon, multicomponent compounds, band gap width.*

Актуальність дослідження. Визначення можливостей застосування нових напівпровідників матеріалів у фізиці напівпровідників вимагає зростання та дослідження фізичних властивостей матеріалів. Деякі подвійні та трьохкомпонентні напівпровідники з шаруватою кристалічною структурою, такі як халькогеніди III групи (InSe, GaSe, GaTe, $TlInSe_2$, $TlInS_2$, $TlGaSe_2$ тощо) є ретельно досліджено і вже доведено їх застосовність у фізиці

твердого тіла, наприклад, для оптоелектронних пристроїв (Kerimova, 2000).

Однак інтерес як науковців, так і практиків до таких напівпровідників зростає з кожним роком. Тому розширення класу шаруватих напівпровідників, зокрема типу $A^{III}B^{III}C^{VI}$, таких як $TlInSe_2$, отримання високоякісних кристалів і подальше дослідження їх комплексу фізичних властивостей є актуальними завданнями у сучасній фізиці твердого тіла. Один із методів модифікації їх фізичних властивостей є отримання твердих розчинів цих напівпровідників.

Експериментальні дослідження, проведені на $TlGaSe_2$ і $TlInSe_2$ демонструють, що дослідження фізичні властивості системи $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ є досить перспективними з огляду на створення нових матеріалів для оптичних приладів видимого діапазону (Orudzhev, 2003).

Сполуки напівпровідників типу $A^{III}B^{III}C_2^{VI}$ мають властивості, які є привабливими для використання в різних оптоелектронних пристроях через їхню технологічну перевагу. Кристали з цієї групи є доступними на ринку і використовуються в виробництві пристроїв нелінійної оптики та сонячних елементів. Наприклад, кристали $TlInSe_2$ мають властивості, які забезпечують високу чутливість до ближнього інфрачервоного випромінювання та стійкість до радіації. Ці характеристики роблять їх перспективними для створення детекторів і приймачів випромінювання, а також для функціональних пристроїв, що можуть керуватися електричним полем навіть в умовах високої радіаційної активності (Kerimova, 2000).

Мета дослідження. Дослідження зміни фізичних властивостей від молярного вмісту перспективних композитів для оптоелектронної техніки.

Викладення основного матеріалу. Оптичні вимірювання є найважливішими методами для визначення зонної структури напівпровідників. Один з основних методів дослідження дефектного стану напівпровідника – це вивчення енергетичної залежності коефіцієнта поглинання світла. Електронні переходи, ініційовані фотонами, можуть відбуватися між різними зонами, що призводить до визначення енергії забороненої зони, або в межах однієї зони, що відображає поглинання на вільних носіях. Оптичні вимірювання також можуть використовуватися для аналізу коливань решітки, таких як фонони.

Для держання інформації про структуру енергетичних досліджують спектри поглинання світла напівпровідником. Як наслідок особливостей напівпровідники прийнято поділяти на прямозонні та непрямозонні. Фотон може поглинутись у результаті переходу електрона з заповненого стану валентної зони в вільний стан зони провідності. Цей процес є основним у фотодетекторах або сонячних батареях. У світлодіодах цей процес є зворотнім. Для фотонів, які поглинаються або випромінюються, загальна теорія для оптичних переходів між валентною і зоною провідності заснована на так званому правилі $\vec{k}$ -відбору ($\vec{k}_1 = \vec{k}_2$).

Згідно з (Davydyuk, 2013), для кристалів $Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}_xSe_2$ (D^{IV} – Si, Ge) залежності $\alpha = f(h\nu)$ мають складний характер. Також із зменшенням вмісту x (зменшенням умісту $D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – Si, Ge)) край смуги фундаментального поглинання зміщується в область менших енергій. Відповідальні за зміщення два процеси (Davydyuk, 2013; Mozolyuk, 2011) – статичне заміщення атомів індію атомами кремнію (чи германію, олова) і збільшення концентрації вакансій талію V_{Tl}. Саме ці процеси є домінуючими в зміні ширини забороненої зони (Tauc, 1966). Внаслідок заміщення атомів індію (In^{+3}) атомами D^{IV} (D^{IV} – Si^{+4}, Ge^{+4}) утворюються донорні центри. У результаті утворення позитивно заряджених іонів (донорів) та негативно заряджених іонів (V_{Tl} − акцепторів) зростає енергія іонного зв'язку між ними. Збільшення енергії зв'язку між атомами кристала веде до зростання E_g і зменшення міжатомної відстані, а отже, об'єму елементарної комірки сплавів (Mozolyuk, 2011).

Для оцінення величини оптичної ширини забороненої зони було використано метод Тауца (Piasecki, 2016). Аналіз спектрів поглинання при T = 300 K показав, що у різних енергетичних діапазонах експериментальні залежності $\alpha = f(h\nu)$ в усіх твердих розчинах спрямлюються в координатах $(\alpha h\nu)^{1/2}$ та $(\alpha h\nu)^2$. Це свідчить про реалізацію в даних твердих розчинах одночасно як непрямих, так і прямих дозволених переходів (Myronchuk, 2014; Zamurueva, 2014).

За оптичними вимірюваннями встановлено залежності значень величин енергетичної

щілини від молярного вмісту x компонент $SiSe_2$, $GeSe_2$ для кристалічних сполук $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$, $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ ($x \le 0{,}2$). На рис. 1 зображені для залежності енергетичної щілини від молярної частки x.

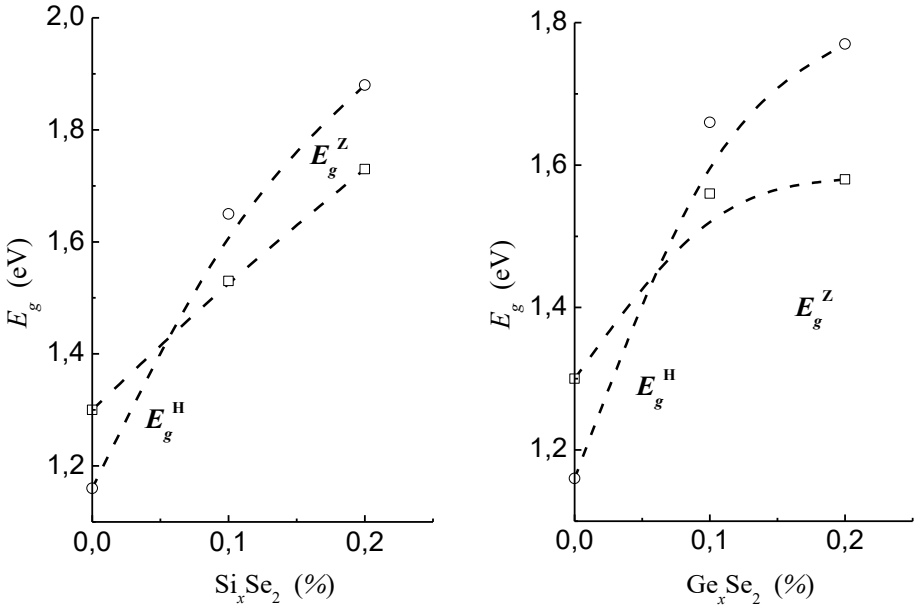
Для $0 \le x < 0{,}1$ усі досліджувані напівпровідники є прямозонними. При $x \ge 0{,}1$ непрямозонні, E_g збільшується наступним чином:

Від E_g	**при** x	**до** E_g	**при** x	**Для матеріалів**
1,53	0,1	1,73	0,2	$Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$
1,56	0,1	1,58	0,2	$Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$

На рисунку 2 показані відповідні діаграми енергії-імпульсу для досліджуваних сполук в залежності від вмісту. Зазначено, що зона провідності має два мінімуми: один вздовж H-осі, який є прямим мінімумом, та інший вздовж Z-осі, який є непрямим мінімумом (Zamurueva, 2014). Така структура енергетичної зони не суперечить вказаним джерелам. Електрони в прямому мінімумі зони провідності та дірки в максимумі валентної зони мають однакові імпульси, в той час як електрони в непрямому мінімумі мають інший імпульс. Для прямозонних напівпровідників, таких як $TlInSe_2$, $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$, $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ ($x < 0{,}1$), імпульс при міжзонних переходах зберігається, тому ці переходи характеризуються високим степенем ймовірності. У прямозонних матеріалах процес випромінювальної рекомбінації є домінуючим. У той час для $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$, $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ при $x \ge 0{,}1$, у яких заборонена зона непряма, ймовірність міжзонних переходів надзвичайно мала, оскільки в цьому випадку для збереження імпульсу при переході необхідна участь фононів або інших факторів розсіювання. Тому для підсилення випромінювальних переходів у непрямозонних напівпровідниках спеціально створюють рекомбінаційні центри.

Як показано на рис. 1, кристалічні сполуки $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$, $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ ($x \le 0{,}2$) охоплюють широкий спектр від інфрачервоного до початку видимого спектра ($1{,}07 \div 0{,}72$ мкм). Прямий і непрямий переходи в забороненій зоні відбуваються приблизно при 1,40-1,45 еВ ($SiSe_2$, $GeSe_2$), а ефективність для генерації довжин хвиль при непрямій забороненій зоні дуже мала.

Ефективні центри випромінювальної рекомбінації можуть бути створені шляхом введення спеціальних домішок. Введені у напівпровідник атоми вуглецю, заміщують деякі атоми Si, Ge у вузлах кристалічної решітки. Вуглець і кремній обидва елементи IV групи в таблиці Менделєєва і мають однакову зовнішню електронну структуру, а структури їх внутрішніх оболонок суттєво відрізняються. Ця різниця призводить до виникнення поблизу зони провідності



(а) (б)

Рис. 1. Зміна E_g прямих (H) і непрямих переходах зони провідності зі зміною вмісту (а) $SiSe_2$, (б) $GeSe_2$ при T=300ºC

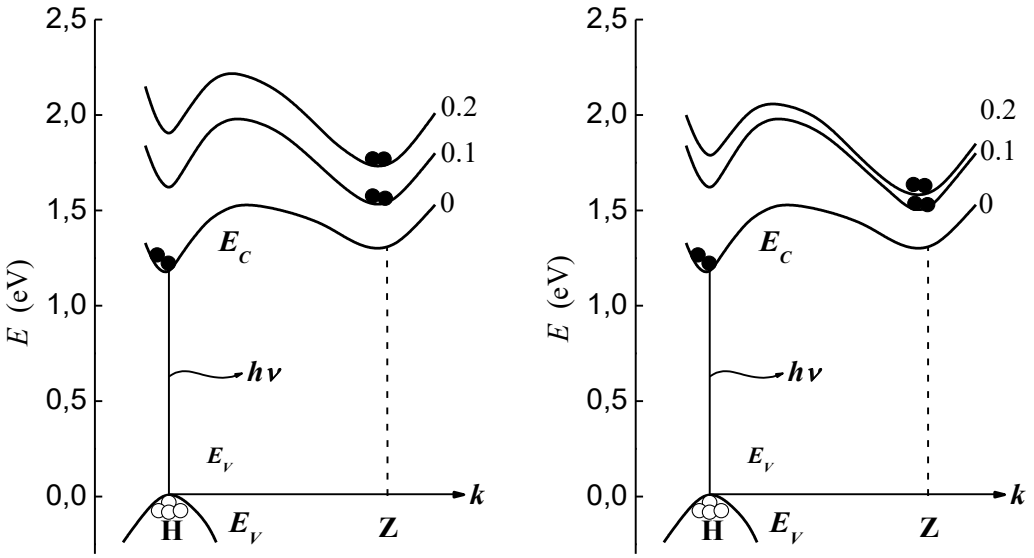


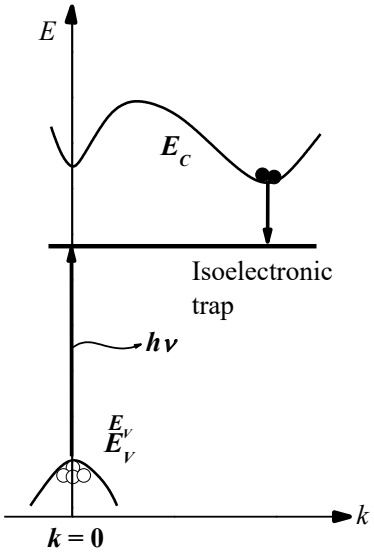
Рис. 2. Енергетична зонна структура при T=300°C (а) $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$, (б) $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$

електронного рівня пастки. Створений таким чином рекомбінаційний центр називається *ізоелектронним центром*. Можливий і інший тип ізоелектронного центра для $SiSe_2$, $GeSe_2$. У нормальному стані ізоелектронні центри нейтральні. Інжектований електрон спочатку захоплюється на центр, а потім негативно заряджений центр захоплює дірку з валентної зони для формування зв'язаного екситону. Подальша анігіляція цієї електронно-діркової пари породжує фотон з енергією, яка приблизно дорівнює різниці між шириною забороненої зони і енергією зв'язку центра. Така система і такий процес показані на $E-k$ діаграмі (рис. 3а). Так як захоплений електрон сильно локалізований на центрі, його імпульс розсіюється. Таким чином забезпечується перетворення квазіімпульсу (не порушується закон збереження імпульсу), внаслідок чого ймовірність прямого переходу суттєво зростає. У непрямозонних матеріалах описаний механізм випромінювальної рекомбінації є переважаючим.

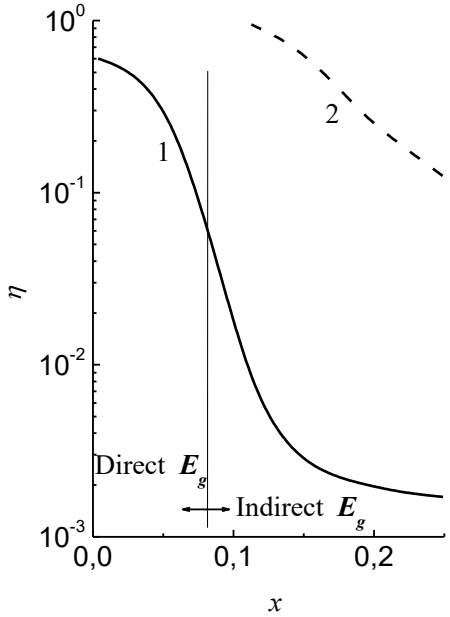
На рис. 3б показана залежність квантової ефективності від вмісту сполуки $Tl_{1-x}In_{1-x}(Si,Ge)_xSe_2$ $\eta = f(x)$ з і без ізоелектронної домішки. Ефективність без домішки різко падає в діапазоні вмісту $0{,}06 < x < 0{,}09$ через близький прямий-непрямий E_g перехід. Ефективність з ізоелектронною домішкою значно більша при $x > 0{,}1$, але все ж продовжує зменшуватись зі збільшенням значення x, це відбувається через різницю в імпульсі між прямою і непрямою забороненими зонами (рис. 2).

Фотодетектори відіграють важливу роль в оптико-волоконних системах зв'язку ближнього ІЧ-діапазону ($0{,}8 \div 1{,}6$ мкм). Вони детектують оптичні сигнали, тобто перетворюють зміни оптичного випромінювання в електричні коливання. Фотодетектори повинні задовольняти жорсткі вимоги, такі як, висока чутливість для робочих довжин хвиль, висока швидкість фотовідгуку (швидкодія) і мінімальний шум.

Коли падаюче світло потрапляє на поверхню фотопровідника, носії генеруються внаслідок збудження або зона-зонних переходів (власне збудження), або переходів між енергетичними рівнями в забороненій зоні (домішкове збудження), що призводить до збільшення провідності $\sigma_i > \sigma_d$ (σ_d – темнова провідність). Провідність власного фотопровідника визначається $\sigma = q(\mu_n n + \mu_p p)$ і збільшується при освітленні, в основному, за рахунок збільшення кількості носіїв. Довгохвильова границя визначається $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1{,}24}{\Delta E(\text{eB})}$ мкм, де ΔE – ширина забороненої зони. Оскільки енергія фотона $h\nu > \Delta E$ теж може викликати збудження, то λ – це максимальна довжина хвилі для детектування.



(а)



(б)

Рис. 3. (а) випромінювальна рекомбінація через ізоелектронну пастку в непрямозонному матеріалі, (б) залежність квантової ефективності від вмісту сполуки $\eta = f(x)$ при 1 – відсутності, 2 – наявності ізоелектронної домішки

Падаюче випромінювання коротших довжин хвиль, поглинається напівпровідником і генеруються електронно-діркові пари. Для домішкового фотопровідника фотозбудження відбувається між краєм зони і домішковим енергетичним рівнем.

Кристали $Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}_xSe_2$ (D^{IV} – Si, Ge) – фоточутливі матеріали (Zamurueva, 2014). Але зміна опору відбувається по різному при кімнатній температурі в діапазоні довжин хвиль $\lambda = 0{,}4 \div 1{,}4$ мкм (рис. 4).

Для $TlInSe_2$ максимум фотопровідності знаходиться при $\lambda \approx 0{,}9$ мкм, а ширина забороненої зони становить 1,12 еВ (Hanias, 1989). При додаванні $D^{IV}_xSe_2$ (D^{IV} – Si, Ge) та зростанні їх молярного вмісту максимум фотопровідності зміщується у короткохвильову область. При температурі 300 К для $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$ $\lambda \approx 0{,}91$ і 0,81 мкм (рис. 4а, криві $1^{/}$ і $1^{//}$). Енергії даних переходів оцінювалися по довгохвильовому краю фотопровідності і виявилися $\approx 1{,}26$ і 1,42 еВ. Таким переходам можуть відповідати непрямі переходи електронів із валентної зони в долини зони провідності (з випромінюванням фононів) (рис. 2а). Для $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ $\lambda \approx 1{,}03$ і 0,95 мкм (рис. 4а, криві $2^{/}$ і $2^{//}$), а відповідно $E \approx 1{,}15$ і 1,17 еВ.

При температурі 300 К максимуми фотопровідності для усіх сполук знаходяться в області фундаментальних переходів або близької до неї. Від молярного вмісту та типу додаючої компоненти змінюються довгохвильова границя фотопровідності $\lambda = f(x)$ (рис. 5а) і фоточутливість $\sigma_i/\sigma_d = f(x)$ (рис. 5б). Довгохвильова границя фотопровідності змінюється від $\lambda \approx 1{,}12$ мкм до $\lambda \approx 0{,}87$ мкм для $SiSe_2$, $\lambda \approx 1{,}06$ мкм для $GeSe_2$. Фоточутливість $\sigma_i/\sigma_d = f(x)$ кристалічних сполук $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$, $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ ($x \le 0{,}2$) зменшується.

Висновки. Напівпровідникові кристали твердих розчинів $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – Si, Ge), перспективні матеріали сучасної оптоелектронної техніки, для застосування у фотоніці та фотовольтаїці. Оцінена ширина забороненої зони складає 1,12 та 1,69 еВ. Зміна фізичних характеристик від молярного вмісту компоненту x, що пов'язана зі зміною зонної структури, істотно розширює функціональні можливості кристалічних сполук $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – Si, Ge).

Встановлено при T = 300 К основні фотонні параметри кристалів твердих розчинів $TlInSe_2$–$D^{IV}Se_2$ (D^{IV} – Si, Ge) від молярного вмісту $SiSe_2$, $GeSe_2$, в якості використання як функціональних матеріалів для оптоелектронних

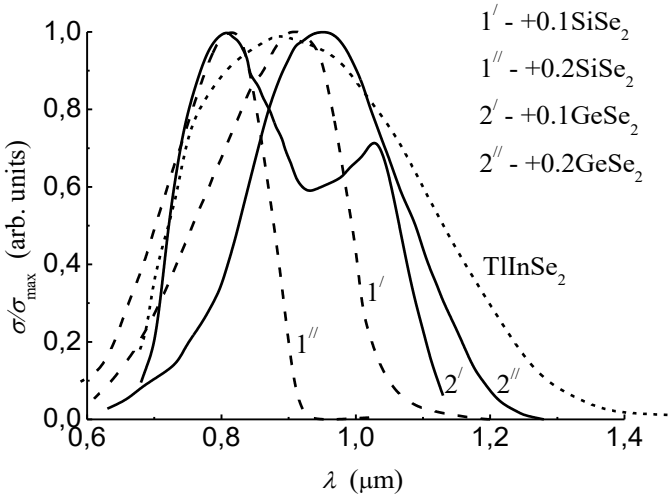
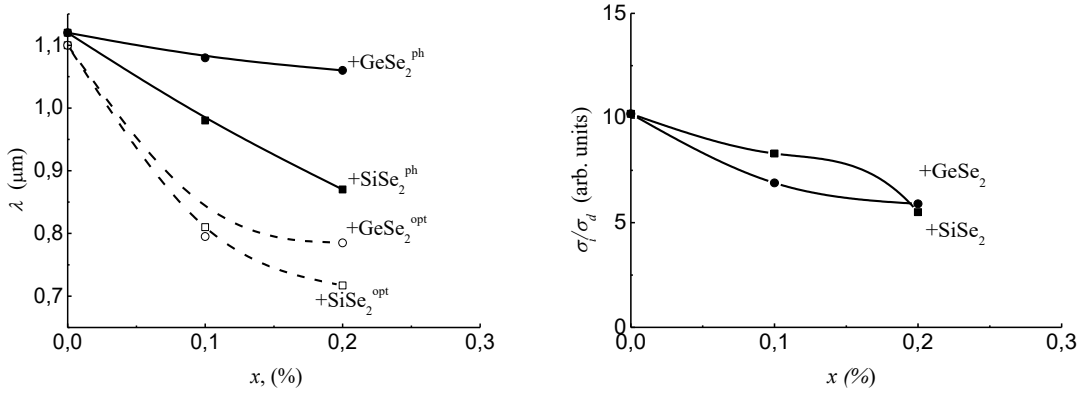


Рис. 4. Спектральний розподіл фотопровідності $\sigma/\sigma_{\max} = f(\lambda)$ для $Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}{}_xSe_2$ (D^{IV} – Si, Ge)



(а) (б)

Рис. 5. Залежність від молярного вмісту $SiSe_2$, $GeSe_2$ для сполук $Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}{}_xSe_2$ (D^{IV} – Si, Ge) при *T* = 300 К (а) довгохвильової границі фотопровідності $\lambda = f(x)$, (б) максимуму фоточутливості $\sigma_i/\sigma_d = f(x)$

пристроїв. Тому, маючи добре налагодженні технології одержання кристалічних сполуках $Tl_{1-x}In_{1-x}D^{IV}{}_xSe_2$ (D^{IV} – Si, Ge), можна одержувати багатофункціональні матеріали для оптоелектронних пристроїв. Шляхом зміни молярного вмісту компонентів x можна передбачити, як зміниться механізм міжзонних переходів у напівпровідниках, що розширює можливості практичного використання цього матеріалу для світлочутливих або фотопристроїв.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Kerimova E., Mustafaeva S., Guseinova D., et al. The Influence of Hydrostatic Pressure on the Electrical Conductivity and Optical Properties of Chain-Layered $TlInSe_2$ and $TlInSe_2$–$TlInS_2$. *Solid Solutions Phys. Status Solidi A*, 2000. Vol. 179(1). 199.

2. Orudzhev G., Mamedov N., Uchiki H., et al. Band structure and optical functions of ternary chain $TlInSe_2$. *Physical Chemistry Chemical Physics.* 2003. Vol. 64 (9–10). 1703.

3. Davydyuk G. E., Khyzhun O. Y., Reshak A. H., et al. Photoelectrical properties and the electronic structure of $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$ (x = 0, 0.1, 0.2, 0.25) single crystalline alloys. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2013. Vol. 15. 6965.

4. Davydyuk G.E., Piasecki M., Parasyuk O.V., et al. Two-photon absorption of $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$ (x = 0, 0.1, 0.2, 0.25) single crystalline alloys and their nanocrystallites. *Optical Materials* 2013. Vol. 35(12). 2514.

5. Mozolyuk M. Yu., Piskach L. V., Fedorchuk A. O., et al. Phase diagram of the quasi-binary system $TlInSe_2$–$SnSe_2$. *Journal of Alloys and Compounds*. 2011. Vol. 509(6). 2693.

6. Tauc J., Grigorovici R., Vancu A. Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium. *Physica Status Solidi B*. 1966. Vol. 15(2), 627.

7. Piasecki M., Myronchuk G.L., Zamurueva O.V., et al. Huge Operation by Energy Gap of Novel Narrow Band Gap $Tl_{1-x}In_{1-x}B_xSe_2$ (B=Si, Ge): DFT, X-ray Emission and Photoconductivity Studies. *Mater. Res. Express.* 2016. Vol. 3(2). 025902.

8. Myronchuk G.L., Zamurueva O.V., Parasyuk O.V., et al. Structural and optical properties of novel optoelectronic $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$ single crystals. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics.* 2014. Vol. 25(7). 3226.

9. Zamurueva O.V., Myronchuk G.L., Lakshminarayana G., et al. Structural and optical features of novel $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ chalcogenide crystals. *Optical Materials.* 2014. Vol. 37. 614.

10. Hanias M., Anagnostopoulos A.N., Kambas K. On the non-linear properties of $TlInX_2$ (X = S, Se, Te) ternary compounds. *Physica B: Condensed Matter.* 1989. Vol. 160(2). 154.

REFERENCES:

1. Kerimova, E., Mustafaeva, S., Guseinova, D., et al. (2000). The Influence of Hydrostatic Pressure on the Electrical Conductivity and Optical Properties of Chain-Layered $TlInSe_2$ and $TlInSe_2$–$TlInS_2$. *Solid Solutions Phys. Status Solidi A*, Vol. 179(1). 199.

2. Orudzhev, G., Mamedov, N., Uchiki, H., et al. (2003). Band structure and optical functions of ternary chain $TlInSe_2$. *Physical Chemistry Chemical Physics.* Vol. 64(9-10). 1703.

3. Davydyuk, G.E., Khyzhun, O.Y., Reshak, A.H., et al. (2013). Photoelectrical properties and the electronic structure of $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$ (x = 0, 0.1, 0.2, 0.25) single crystalline alloys. *Physical Chemistry Chemical Physics.* Vol. 15. 6965.

4. Davydyuk, G.E., Piasecki, M., Parasyuk, O.V., et al. (2013). Two-photon absorption of $Tl_{1-x}In_{1-x}Sn_xSe_2$ (x = 0, 0.1, 0.2, 0.25) single crystalline alloys and their nanocrystallites. *Optical Materials.* Vol. 35(12). 2514.

5. Mozolyuk, M.Yu., Piskach, L.V., Fedorchuk, A.O., et al. (2011). Phase diagram of the quasi-binary system $TlInSe_2$–$SnSe_2$. *Journal of Alloys and Compounds*. Vol. 509(6). 2693.

6. Tauc, J., Grigorovici, R., & Vancu, A. (1966). Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium. *Physica Status Solidi B*. Vol. 15(2), 627.

7. Piasecki, M., Myronchuk, G.L., Zamurueva, O.V., et al. (2016). Huge Operation by Energy Gap of Novel Narrow Band Gap $Tl_{1-x}In_{1-x}B_xSe_2$ (B=Si, Ge): DFT, X-ray Emission and Photoconductivity Studies. *Mater. Res. Express.* Vol. 3(2). 025902.

8. Myronchuk, G.L., Zamurueva, O.V., Parasyuk, O.V., et al. (2014). Structural and optical properties of novel optoelectronic $Tl_{1-x}In_{1-x}Si_xSe_2$ single crystals. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics.* Vol. 25(7). 3226.

9. Zamurueva, O.V., Myronchuk, G.L., Lakshminarayana, G., et al. (2014). Structural and optical features of novel $Tl_{1-x}In_{1-x}Ge_xSe_2$ chalcogenide crystals. *Optical Materials.* Vol. 37. 614.

10. Hanias, M., Anagnostopoulos, A.N., Kambas, K. (1989). On the non-linear properties of $TlInX_2$ (X = S, Se, Te) ternary compounds. *Physica B: Condensed Matter.* Vol. 160(2). 154.

УДК 621.315.592
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-3

Андрій КЕВШИН
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-3581-8852*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 35422272900*

Тетяна ЯЦИНЮК
аспірантка кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл.,Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0001-7288-3189*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 57658704300*

Володимир ГАЛЯН
доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-0066-7174*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 35422525700*

Ганна ШАВАРОВА
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-0251-9327*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 6506685303*

Віталій АРТЮХ
аспірант навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-7785-6072*

Бібліографічний опис статті: Кевшин, А., Яцинюк, Т., Галян, В., Шаварова, А., Артюх, В. (2024). Загальна характеристика халькогенідних напівпровідників та їх застосування (огляд). *Фізика та освітні технології*, 1, 25–30, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-3

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ХАЛЬКОГЕНІДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ (ОГЛЯД)

Халькогенідні напівпровідники (ХН) на сьогодні знаходять широке використання у сучасних пристроях мікро і наноелектроніки, що обумовлено їхніми унікальними фізико-хімічними властивостями. На сьогодні зібрано величезну кількість експериментальних даних про властивості таких напівпровідників, проте багато фундаментальних проблем ще не вирішено. Тому актуальним завданням на сьогодні є систематизувати наукову інформацію про ці матеріали, що дозволить розробляти нові концепції та ідеї стосовно поведінки ХН та їх практичного використання.

У даній роботі розглядається загальна характеристика халькогенідних напівпровідників. Зокрема, акцентовано увагу на особливостях синтезу ХН як у кристалічному, так і в склоподібному станах. Такі матеріали можуть бути леговані рідкісноземельними металами (РЗМ): Er, Nd, Pr, Eu, Yb, тощо. Це розширює область їх практичного використання в оптоелектронній і лазерній техніці.

Особливе місце займають халькогенідні склоподібні напівпровідники (ХСН), які характеризуються високою прозорістю в інфрачервоній ділянці спектру, високим показником заломлення, хімічною стійкістю, високою оптичною нелінійністю, що призвело до широкого їх використання в медицині, військовій техніці, космічній галузі та телекомунікаціях. При цьому найбільш стабільними ХСН є бінарні стекла, в склоутворюючу матрицю яких можна вбудувати велику різноманітність атомів, отримавши при цьому широкий композиційний діапазон сполук з різними енергіями забороненої зони і, відповідно, різними фізичними властивостями.

Важливий напрямок розробки високочистих халькогенідних стекол пов'язано з використанням їх як матриці для рідкісноземельних елементів з метою створення твердотільних джерел випромінювання, волоконно-оптичних лазерів та підсилювачів випромінювання середнього ІЧ-діапазонів. Обмежуючим фактором для практичного використання таких матеріалів є необхідність їх синтезу з високою хімічною і фізичною чистотою, з низькою концентрацією або відсутністю гідроксильних, оксидних і вуглеводних груп.

Ключові слова: *халькогенідний напівпровідник, сірка, селен, телур, домішкові смуги поглинання.*

Andrii KEVSHYN
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-3581-8852*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 35422272900*

Tetiana YATSYNIUK
Graduate student of the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0001-7288-3189*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 57658704300*

Volodymyr HALYAN
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-0066-7174*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 35422525700*

Hanna SHAVAROVA
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-0251-9327*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 6506685303*

Vitaly ARTYUKH
graduate student of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-7785-6072*

To cite this article: Kevshin, A., Yatsyniuk, T., Halyan, V., Shavarova, H., Artyukh, V. (2024). Zahalna kharakterystyka khalkohenidnykh napivprovidnykiv ta yikh zastosuvannia (ohliad) [The main characteristic of chalcogenide conductors and their applications (review)]. *Physics and educational technologies*, 1, 25–30, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-3

THE MAIN CHARACTERISTIC OF CHALCOGENIDE CONDUCTORS AND THEIR APPLICATIONS (REVIEW)

Chalcogenide semiconductors (CHS) are currently widely used in modern micro and nanoelectronics devices due to their unique physicochemical properties. To date, a huge amount of experimental data on the properties of such semiconductors has been collected, but many fundamental problems have not yet been solved. Therefore, an urgent task today is to systematize scientific information about these materials, which will allow to develop new concepts and ideas regarding the behavior of HN and their practical use.

This work considers the general characteristics of chalcogenide semiconductors. In particular, attention is focused on the peculiarities of the synthesis of CHN in both crystalline and glassy states. Such materials can be alloyed with rare earth metals (REM): Er, Nd, Pr, Eu, Yb, etc. This expands the field of their practical use in optoelectronic and laser technology.

A special place is occupied by chalcogenide glass-like semiconductors (CSN), which are characterized by high transparency in the infrared region of the spectrum, high refractive index, chemical stability, high optical nonlinearity, which has led to their wide use in medicine, military equipment, the space industry, and telecommunications. At the same time, the most stable CCHs are binary glasses, in the glass-forming matrix of which a large variety of atoms can be incorporated, thus obtaining a wide compositional range of compounds with different band gap energies and, accordingly, different physical properties.

An important direction in the development of high-purity chalcogenide glasses is related to their use as a matrix for rare-earth elements in order to create solid-state radiation sources, fiber-optic lasers and amplifiers of radiation in the mid-IR ranges. A limiting factor for the practical use of such materials is the need for their synthesis with high chemical and physical purity, with a low concentration or absence of hydroxyl, oxide and carbohydrate groups.

Key words: *chalcogenide semiconductor, sulfur, selenium, tellurium, impurity absorption bands.*

Назва халькогенід походить від грецького слова «chalcos», що означає руда та «gen» – походження. До халькогенідів відносять елементи шостої групи періодичної таблиці: сірка (S), селен (Se), телур (Te). Вони існують в природі у вигляді мінералів та можуть бути синтезовані в наукових лабораторіях. Найбільш відомий халькогенідний мінерал FeS_2 – пірит, сульфід заліза, рідше зустрічається в природніх умовах $AuTe_2$ – калаверит, дителурид золота.

В лабораторіях халькогенідні напівпровідники утворюють додаванням до халькогенідів таких елементів, як Ge, Ga, As, In, Zn, La, Sb Si та ін. Вони характеризуються низькою енергією фононів [1, 2] і, як правило, є прозорими у видимому та інфрачервоному спектральних діапазонах. Халькогенідні кристали та стекла можуть бути леговані рідкісноземельними металами (РЗМ) [3, 4]: Er, Nd, Pr, Eu, Yb, тощо. Оптичне волокно виготовлене із халькогенідного скла пропускає світло в ІЧ діапазоні спектру, тому його застосовують в медицині, військовій техніці, космічній галузі та телекомунікаціях [5, 6].

Бінарні халькогенідні стекла (наприклад GeS_2, $GeSe_2$, As_2S_3, As_2Se_3 та As_2Te_3) є найбільш стабільними і згідно структурної моделі вважаються подібними до аморфного SiO_2. При заміні халькогена S → Se → Te відбувається зменшення енергії забороненої зони і, відповідно, змінюється колір халькогенідного скла/кристалу від жовтого (в германієвих) та від червоного (в арсеновмісних) до сірого (рис. 1, 2).

В склоутворюючу матрицю бінарних стекол можна вбудувати велику різноманітність атомів, отримавши при цьому широкий композиційний діапазон сполук. Крім того, халькогеніди деяких елементів не є добрими склоутворювачами (наприклад сульфід галію), але легко зв'язуються із сульфідами германію, натрію або лантану, утворюючи стекла [7, 8]. Модифікований домішками важких металів дисульфід германію можна отримати у склоподібному стані лише за технологією швидкого гартування [9].

Характерні властивості халькогенідних матеріалів описав С. Р. Еліот [14] і класифікував їх за типом атомів, з якими вони зв'язуються, утворюючи при цьому аморфні системи. У таблиці 1 халькогеніди згруповано згідно з компонентним складом.

Прикладом відомого бінарного халькогеніду є трисульфід миш'яку, який переважно існує у скляній фазі. Навпаки, сполуки на основі більш важких халькогенідів, наприклад, на основі телуру, легко кристалізуються,тому їх важко отримати в склоподібному стані без кристалічних включень.

Для застосування кристалічних та склоподібних халькогенідів у ролі активних/пасивних середовищ у лазерній техніці, оптичних

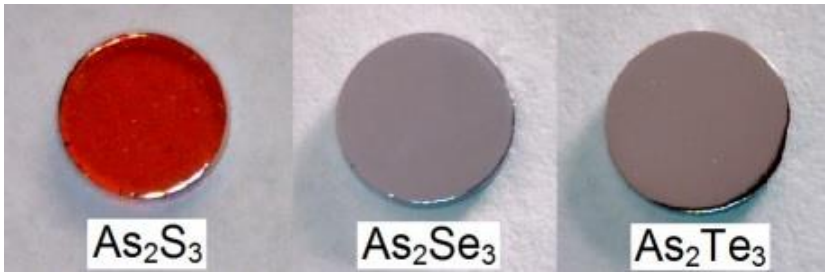


Рис. 1. Фото арсеновмісних халькогенідних стекол [10]

GeS_2 [11] $GeSe_2$ [12] $GeTe_2$ [13]

Рис. 2. Фото германієвих халькогенідних кристалів

Таблиця 1

Групи аморфних халькогенідних систем [19]

Група	Приклади халькогенідів
Чисті халькогеніди	S, Se, Te, S_xSe_{1-x}
Халькогеніди з елементами п'ятої групи періодичної системи	(V-VI) As_2S_3, P_2Se
Тетрагональні халькогеніди	(IV-VI) $SiSe_2$, GeS_2 (III-VI) B_2S_3, In_xSe_{1-x}
Металічні халькогеніди	MoS_3, WS_3, Ag_2S-GeS_2
Халькогалогеніди	As-Se-I, Ge-S-Br, Te-Cl

підсилювачах, оптоволокні і т.п., необхідна висока їх чистота, а також низькі енергетичні втрати в широкому спектральному діапазоні. З огляду на вказані вимоги щодо оптичних властивостей халькогенідних напівпровідників, встановлено, що в матеріалах легованих РЗМ виникають домішкові смуги поглинання, які пов'язують з гідроксильною групою OH^- [15]. Остання виникає в склоутворюючій матриці з водяної пари внаслідок існування неконтрольованих домішок у вихідних хімічних елементах та недосконалості технології синтезу сплаву. Наявність гідроксильної групи призводить до утворення зв'язків із іонами основної речовини, що негативно впливає на радіаційні властивості кристала / скла. У таблиці 2 подано перелік максимумів смуг поглинання, які призводять до енергетичних втрат при проходженні через них випромінювання та відповідні їм структурні групи.

Висновки. Халькогенідні напівпровідники широко використовують в оптичних приладах, які працюють у видимому та інфрачервоному спектральних діапазонах. Їх можна використовувати як пасивні оптичні фільтри (ZnS, ZnSe, As_2S_3), фотоприймачі (PbS, PbSe, GdTe), а також при легуванні рідкісноземельними металами як оптичні підсилювачі та перетворювачі світла із інфрачервоного спектрального діапазону у видимий. Для ефективної та довготривалої роботи електронних та оптичних пристроїв на основі халкогенідів, надзвичайно важливим є очищення вихідних компонентів та дотримання всіх технологічних процесів при синтезі халькогенідних стекол та вирощуванні монокристалів.

Таблиця 2

Домішкові смуги поглинання у халькогенідних напівпровідниках [16]

Тип напівпровідника за основною компонентою	Довжина хвилі (мкм)	Структурна група
Сульфідні	4,03	S-H
	3,69	
	3,11	
	2,54	
	2,05	
	2,91	SO-H
	2,29	
	1,92	
	1,44	
	6,32	H_2O
	2,77	
	2,78	OH
	2,84	
Селенідні	3,53	Se-H
	4,12	
	4,57	
	2,92	SeO-H
	4,57	Se-H
Германієві	4,92	Ge-H
	7,8	Ge-O
	12,5	
	20	
Арсенідні	10,8	AsO-H
	5,48	

ЛІТЕРАТУРА:

1. Галян В. В., Яцинюк Т. К., Юхимчук В. О., Вірко С. В., Лящук Ю. М., Валах М. Я., Іващенко І. А., та інші. Оптичні властивості γ -чутливого кристала β -$GaLaS_3Er$. Журнал фізики D|: *Прикладна фізика*. 2023. № 56. С. 435102.
2. Валах М. Я, Литвинчук А. П., Гаврилюк Є., Юхимчук В., Джаган В. та інші. Раманівські та інфрачервоні активні фонони в нелінійному напівпровіднику $AgGaGeS_4$. *Кристали.* 2023. 13(1). С. 148.
3. Яцинюк Т., Кевшин А., Галян В., Іващенко І., Артюх В., Березнюк О., Тарасенко А. Люмінесцентні властивості стекол Ag_2S-GeS_2 та Ag_2S-GeS_2-Sb_2S_3 легованих ербієм та неодимієм. *Фізика та освітні технології.* 2023. Вип.4. С. 28–34.
4. Блан В., Цой Ю. Г. Zhang X та ін. Минуле, сьогодення та майбутнє фотонних стекол: Огляд на честь Міжнародного року скла ООН 2022. *Прогрес у матеріалознавстві*. 2023. 134. С. 101084.
5. Ву І., Менегнетті М., Тролес Й., Адам Ж-Л. Халькогенідні мікроструктуровані оптичні волокна для генерації середнього інфрачервоного суперконтинууму: інтерес, виготовлення та застосування. *Прикладні науки*. 2018. 8. С. 1637.
6. Кумар А., Шукла Р. К., Кумар А., Гупта Р. Світлові ефекти та дефекти в халькогенідних склоподібних напівпровідниках: огляд. *Інфрачервона фізика та технології.* 2019. 102. С. 103056.
7. Галян В. В, Юхимчук В. О., Гюле Є. Г., Кітик І. В., Жидачевський Я., Іващенко І. А., та інші. Особливості стоксової фотолюмінесценції стекол La_2S_3 –Ga_2S_3 –Er_2S_3. *Оптичні матеріали*. 2022. 128. С. 112394.
8. Галян В. В., Юхимчук В. О., Гюле Є. Г., Озга К., Єдрика К. Й., Іващенко І. А., та інші. Особливості фотолюмінесценції та нелінійно-оптичні властивості стекол $Ag_{0.05}Ga_{0.05}Ge_{0.95}S_2$–$Er_2S_3$. *Оптичні матеріали*. 2019. 90. С. 84–88.
9. Березнюк, О., Петрусь, І., Смітюх, О., Олексеюк, І. Склоутворення в квазіпотрійних системах A^I_2 S–$B^{IV}S_2$–C^V_2 S_3 (A^I–Cu, Ag; B^{IV}–Ge, Sn, C^V–As, Sb). *Проблеми хімії та сталого розвитку*. 2021. Вип. 4. с. 3–10.
10. Лукас П., Коулман Д.Г., Цзян Ш., Ло Т., Ян Ч. Волокна з халькогенідного скла: виготовлення оптичного вікна та придатність для біохімічного зондування. *Оптичні матеріали*. 2015. 47. С. 530–536.

11. Твер'янович А. С., Ціок О. В., Бражкін В. В., Бокова М., Сосет А., Бичков Є. Надзвичайно стабільний склоподібний GeS_2, ущільнений при 8,3 ГПа: прихований поліаморфізм, контрастні оптичні властивості, дослідження раманівського розсіювання та DFT та передові програми. *Журнал фізичної хімії* Б. 2023. 127. 45. С. 9850–9860.

12. Мішень для розпилення селеніду германію (II) ($GeSe_2$). URL: https://www.funcmater.com/germanium-ii-selenide-gese2-sputtering-target.html.

13. Порошок телуриду германію (II) ($GeTe_2$). URL: https://www.funcmater.com/germanium-ii-telluride-gete2-powder.html.

14. Еліотт С. Р. Халькогенідні окуляри. *МатерНаукаТехнол*. ВЧ. 1991. 9. С. 438.

15. Лю С., Цзяо Ц., Чжан Є., Чжен Ц., Сун С., Інь Г. Йодид срібла сприяє структурній характеристиці та інфрачервоним властивостям у стеклах GeS_2 –Ga_2S_3 –La_2S_3. *Інфрачервона фізика та технології*. 2019. 102. С. 103064.

16. Канаморі Т., Терунума Ю., Такаші С., Міясіта Т. Характеристики втрат при передачі скляних волокон без покриття $As_{40}S_{60}$ і $As_{38}Ge_5Se_{57}$. *Журнал некристалічних твердих речовин.* 1985. 69. С. 231–242.

REFERENCES:

1. Halyan, V.V., Yatcynyuk, T.K., Yukhymchuk, V.O., Virko, S.V., Lyashchuk, Yu.M., Valakh, M.Ya., Ivashchenko, I.A., et al. (2023). Optical properties of γ-sensing β-$GaLaS_3$:Er crystal. *Journal of Physics D: Applied Physics*., 56, P. 435102.

2. Valakh, M, Litvinchuk, A P, Havryliuk, Ye, Yukhymchuk, V, Dzhagan, V. et al (2023). Raman- and Infrared-Active Phonons in Nonlinear Semiconductor AgGaGeS4. *Crystals*. 2023. 13, p. 148.

3. Yatsyniuk, T., Kevshin, A., Galyan, V., Ivashchenko, I., Artyukh, V., Bereznyuk, O., & Tarasenko, A. (2023). Liuminestsentni vlastyvosti stekol Ag_2S-GeS_2 ta Ag_2S-GeS_2-Sb_2S_3 lehovanykh erbiiem ta neodymiiem [Luminescent properties Ag_2S-GeS_2 and Ag_2S-GeS_2-Sb_2S_3glasses doped with erbium and neodymium*]. Fizyka ta osvitni tekhnolohii – Physics and educational technologies*, p. 28–34 [in Ukrainian].

4. Blanc, W.,. Choi, Y.G,. Zhang, X et al. (2023). The past, present and future of photonic glasses: A review in homage to the United Nations International Year of glass 2022. *Progress in Materials Science*, 134, p. 101084

5. Wu, Y., Meneghetti, M., Troles, J., & Adam, J-L. (2018). Chalcogenide Microstructured Optical Fibers for Mid-Infrared Supercontinuum Generation: Interest, Fabrication, and Applications. *Appl. Sci.*8, P. 1637.

6. Kumar, A, Shukla, R.K., Kumar, A., & Gupta, R. (2019) Light induced effects & defects in chalcogenide glassy semicoductors: A review, *Infrared Phys. Technol.*102, P. 103056.

7. Halyan, V.V., Yukhymchuk, V.O., Gule, Ye.G., Kityk, I.V., Zhydachevskyy, Ya., Ivashchenko, I.A., et al (2023). Specific features of Stokes photoluminescence of the La_2S_3–Ga_2S_3–Er_2S_3 glasses.*Optical Materials,* 128, P. 112394.

8. Halyan, V.V., Yukhymchuk, V.O., Gule, Ye.G.,, Ozga, K., Jedryka, K.J., Ivashchenko, I.A., et al. (2019). Photoluminescence features and nonlinear-optical properties of the $Ag_{0.05}Ga_{0.05}Ge_{0.95}S_2$–$Er_2S_3$ glasses.*Optical Materials*. 90,. P.84–88.

9. Berezniuk, O., Petrus, I., Smitiukh, O., Olekseiuk, I. (2021). Skloutvorennia v kvazipotriinykh systemakh A^I_2 S–$B^{IV}S_2$–C^V_2 S_3 (A^I–Cu, Ag; B^{IV}–Ge, Sn, C^V–As, Sb) [Glass formation in quasi-ternary systems A^I_2 S–$B^{IV}S_2$–C^V_2 S_3 (A^I–Cu, Ag; B^{IV}–Ge, Sn, C^V–As, Sb)]. *Problemy khimii ta staloho rozvytku – Problems of chemistry and sustainable development.* p. 3–10 [in Ukrainian].

10. Lucas, P., Coleman, G.J., Jiang, S., Luo, T., & Yang, Z. (2015). Chalcogenide glass fibers: Optical window tailoring and suitability for bio-chemical sensing. *Optical Materials*, Vol. 47, P. 530–536.

11. Tverjanovich, A.S., Tsiok, O.B., Brazhkin, V.V., Bokova, M., Cuisset, A., & Bychkov, E. (2023).Remarkably Stable Glassy GeS_2 Densified at 8.3 GPa: Hidden Polyamorphism, Contrasting Optical Properties, Raman and DFT Studies, and Advanced Applications.*J. Phys.Chem. B* 127 (45), P. 9850–9860.

12. Germanium (II) Selenide ($GeSe_2$) – Sputtering Target. Retrieved from: https://www.funcmater.com/germanium-ii-selenide-gese2-sputtering-target.html.

13. Germanium (II) Telluride ($GeTe_2$) – Powder. Retrieved from: https://www.funcmater.com/germanium-ii-telluride-gete2-powder.html.

14. Elliott, S.R. (1991) Chalcogenide Glasses. *MaterSciTechnol.*VCH. Vol.9. p 438.

15. Liu, X, Jiao, Q, Zhang, Y et al. (2019). Silver iodide promoted structural characterization and infrared propertiesin GeS_2–Ga_2S_3–La_2S_3glasses.*Infrared Phys Technol.*, 102 p. 103064.

16. Kanamori, T, Terunuma, Y., Takahashi, S., Miyashita, T. (1985). Transmission loss characteristics of $As_{40}S_{60}$ and $As_{38}Ge_5Se_{57}$ glass unclad fibers *J. Non-Cryst. Solids*. V.69.p. 231–242.

УДК 53(092)(477.82)
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-4

Галина МИРОНЧУК
доктор фізико-математичних наук, професор, директор навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0002-9088-3825*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 36245422900*

Ніна ГОЛОВІНА
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
***ORCID ID:** https://orcid.org/0000-0002-1152-1536*

Андрій КЕВШИН
кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
***ORCID ID:** https://orcid.org/0000-0002-3581-8852*
***SCOPUS-AUTHOR ID**: 35422272900*

Бібліографічний опис статті: Мирончук, Г., Головіна, Н., Кевшин, А. (2024). Пам'яті Георгія Євлампійовича Давидюка. *Фізика та освітні технології*, 1, 31–36, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-4

ПАМ'ЯТІ ГЕОРГІЯ ЄВЛАМПІЙОВИЧА ДАВИДЮКА

Висвітлено життєвий шлях та досягнення Георгія Євлампійовича Давидюка – відомого фахівця у галузі фізики, доктора фізико-математичних наук, професора, заслуженого діяча науки і техніки України, завідувача кафедри фізики твердого тіла, проректора з наукової роботи Волинського національного університету імені Лесі Українки.

Школа, Луцький державний педагогічний інститут імені Лесі Українки (1966 р.), посада асистента кафедри фізики для кращого випускника, аспірантура Інституту ядерних досліджень Академії наук України (м. Київ), (1973 р.). Захист кандидатської дисертації, посада старшого викладача, доцента кафедри фізики рідного навчального закладу у Луцьку. Завідувач новоствореної кафедри фізики твердого тіла після реорганізації педінституту в університет (1993 р.). Успішний захист докторської дисертації в Інституті фізики напівпровідників АН України (м. Київ) без перебування в докторантурі (1995 р.) та отримання ученого звання професора (1996 р.). Міжнародний освітньо-науковий грант, фінансований фондом Сороса (США) (1998 р.). Голова спецради з захисту дисертацій зі спеціальності «01.04.10 – фізика напівпровідників та діелектриків». Георгій Євлампійович – організатор науки, керівник наукової школи «Фізика структурних дефектів у напівпровідниках». Підготував 11 кандидатів фізико-математичних наук, опублікував понад 280 наукових праць у республіканських і міжнародних фахових журналах, збірниках і виданнях, із них 10 монографій і навчальних посібників, 4 патенти на винахід.

Головний редактор серії «Фізичні науки» «Наукового вісника Волинського національного університету імені Лесі Українки», член редколегії журналу «Фізика і хімія твердих тіл». Нагороди. Особисті якості людини та громадянина.

***Ключові слова:** життєвий шлях, наукова діяльність, основні результати, наукова школа, Волинський національний університет імені Лесі Українки.*

Galyna MYRONCHUK
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Director of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0002-9088-3825*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 36245422900*

Nina HOLOVINA
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-1152-1536*

Andriy KEVSHYN
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-3581-8852*
SCOPUS-AUTHOR ID*: 35422272900*

To cite this article: Myronchuk, G., Holovina, N., Kevshyn, A. (2024). Pamiati Heorhiia Yevlampiiovycha Davydiuka [In memory of Georgy Yevlampiyovych Davydiuk]. *Physics and Educational Technology*, 1, 31–36, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-4

IN MEMORY OF GEORGY YEVLAMPIYOVYCH DAVYDIUK

The life path and achievements of Georgy Yevlampiyovych Davydiuk, a well-known specialist in the field of physics, doctor of physical and mathematical sciences, professor, honored worker of science and technology of Ukraine, head of the solid state physics department, vice-rector for scientific work of Volyn National University named after Lesya Ukrainka, are highlighted.

School, Lutsk State Pedagogical Institute named after Lesya Ukrainka (1966), the position of assistant of the physics department for the best graduate, postgraduate studies at the Institute of Nuclear Research of the Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv), (1973). Defense of the candidate's thesis, the position of senior teacher, associate professor of the department of physics of the native educational institution in Lutsk. Head of the newly created solid state physics department after the reorganization of the pedagogical institute into a university (1993). Successful defense of a doctoral dissertation at the Institute of Semiconductor Physics of the Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv) without being in the doctoral program (1995) and receiving the academic title of professor (1996). International educational and scientific grant financed by the Soros Foundation (USA) (1998). Chairman of the special council for the defense of dissertations in the specialty «01.04.10 – physics of semiconductors and dielectrics». Georgy Yevlampiyovych – organizer of science, head of the scientific school «Physics of Structural Defects in Semiconductors». Prepared 11 candidates of physical and mathematical sciences, published more than 280 scientific works in republican and international professional magazines, collections and publications, including 10 monographs and training manuals, 4 invention patents.

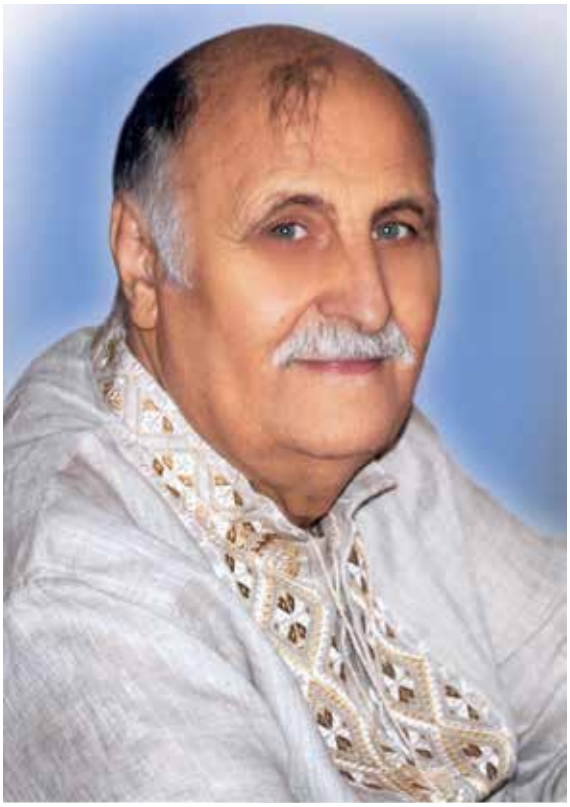
Editor-in-chief of the «Physical Sciences» series of the «Scientific Bulletin of the Volyn National University named after Lesia Ukrainka», member of the editorial board of the «Physics and Chemistry of Solids» magazine. Awards Personal qualities of a person and a citizen.

Key words: *life path, scientific activity, main results, scientific school, Lesya Ukrainka Volyn National University.*

У цьому році виповнюється 80 років від дня народження Георгія Євлампійовича Давидюка – відомого фахівця у галузі фізики, доктора фізико-математичних наук, професора, заслуженого діяча науки і техніки України, завідувача кафедри фізики твердого тіла, проректора з наукової роботи Волинського національного університету імені Лесі Українки.

Народився Георгій 5 січня 1944 року на півночі Казахстану в поселенні репресованих українців у сім'ї Євлампія Давидюка. Після війни, у 1946 році, сім'я Давидюків повернулася на батьківщину, рідну Волинь, у селище міського типу Рожище.

У дитинстві Георгій Давидюк був кволою дитиною, через постійні хвороби (найчастіше це запалення легень) пропускав навчання у школі. Не складалося у хлопця з гуманітарними дисциплінами, проте точні науки він знав «на відмінно» і неодноразово перемагав на олімпіадах. По закінченню школи саме слабке здоров'я завадило вступу до Московського інституту кібернетики, але Георгій здає екзамени на фізико-математичний факультет Луцького педінституту. Та студентом відразу не стає і йде працювати вчителем фізики Киянської середньої загальноосвітньої трудової політехнічної школи з виробничим навчанням. Проте



незабаром з інституту повідомили, що він зарахований студентом. Георгій, один на курсі, здав першу сесію на відмінно. І потім, усі п'ять років не мав жодної четвірки, окрім наукового комунізму у останньому семестрі.

Усі повоєнні роки Луцький педінститут відзначався традиційно високим рівнем підготовки вчителів, фахівців фізики (Головіна, 2010). Завдяки своїй зацікавленості, знанням та підготовці Георгій вирішив учитися далі, одним із перших налаштувався на вступ до аспірантури у Київ. Академічні інститути Національної академії наук України займають чільне місце у підготовці наукового потенціалу країни. У них перебували в аспірантурі, працювали багато науковців, які згодом повернулися на Волинь, озброєні передовою думкою та проводили різнопланові наукові дослідження. Георгій Давидюк був одним із перших волинян, який у 1969 році вступив до аспірантури Інституту фізики Академії Наук України. Правда, не все було так просто: згадали про репресованих батьків, тому цільового направлення він не отримав, а поїхав складати екзамени на загальних підставах.

До цього часу Георгій заручився уже підтримкою рідних людей, адже у 1966 році одружився. Дружина Марія народила сина Юрія. Готувався до вступу в аспірантуру, забавляючись із сином. А сусіди вже тоді називали Георгія Євлампійовича професором.

Згодом, від Інституту фізики відокремився та утворився новий інститут – Інститут ядерних досліджень Академії Наук України. За профілем своєї наукової діяльності Георгій переводиться до аспірантури новоутвореного інституту та працює там на реакторі.

Роки роботи в Інституті ядерних досліджень були цікавими своїми науковими результатами, але не пройшли безслідно для організму. Коли дружина приїхала до Києва і побачила, які всі там бліді ходять, сказала: повертаймося до Луцька, і край. І тривожилася вона недарма. Бо про «невеличкі» аварії на дослідному реакторі знало тоді лише вузьке коло посвячених людей. Це потім дізналися, зокрема, про 28 його колег, які захворіли після однієї такої аварії. Хоча тоді ніхто не пов'язував ці хвороби з опроміненням.

Сам Георгій Євлампійович часто розповідав: «Інколи ми самі легковажили, знімали дозиметри, щоб попрацювати довше, щоб швидше завершити дослідження. Бо якщо на дозиметрі була позначка, вища за допустиму норму, то нас не допускали до роботи».

Закінчив аспірантуру у 1972 році, у 1973 захистив кандидатську дисертацію, повернувся додому, на Волинь, і почав працювати старшим викладачем, доцентом (1975 р.) кафедри фізики Луцького державного педагогічного інституту імені Лесі Українки.

Напередодні Наказом Міністерства освіти за № 229 від 29 вересня 1969 року на фізико-математичному факультеті була відкрита науково-дослідна лабораторія, де почалася робота у двох напрямках: квантова електроніка та фізика напівпровідників (Головіна, 2010). Георгій Євлампійович долучається до роботи лабораторії та стає керівником одного з напрямків.

Наукові дослідження з фізики напівпровідників Георгій Євлампійович розвинув та створив власну наукову школу «Фізика структурних дефектів у напівпровідниках». Першими представниками цієї школи стали Микола Сергійович Богданюк, який як і Давидюк Г.Є. захистив дисертацію у Інституті ядерних досліджень НАН України, Василь Петрович Доскоч, який своє дослідження успішно захистив у Інституті фізики НАН України.

Через горнило лабораторії пройшли практично всі нинішні викладачі інституту. Оскільки створення університету дало змогу відкрити власну аспірантуру, ті люди, які пройшли школу Інституту фізики, Інституту фізики напівпровідників, Інституту ядерних досліджень НАН України мали змогу передавати свої знання та вміння. Що вони успішно і робили. А Георгій Євлампійович став першим керівником першого аспіранта нашого навчального закладу, яким став Володимир Васильович Божко.

Саме за керованим Георгієм Євлампійовичем напрямком, лабораторія вперше, у 1973 році, заключила госпдоговір за тематикою дослідження радіаційних пошкоджень у напівпровідниках з Інститутом ядерних досліджень та військовим відомством. Керівником став Г.Є. Давидюк. Кошти за темою дали змогу купляти апаратуру, проводити дослідження на місці та суміщати їх з викладанням фізики студентам.

Після реорганізації інституту в 1992 році у Волинський державний університет імені Лесі Українки та утворення кафедри фізики твердого тіла, був обраний завідувачем цієї кафедри. Крім навчальної і адміністративної роботи, Георгій Євлампійович активно займається науковою діяльністю, про що свідчить значна кількість публікацій у республіканських і міжнародних виданнях. Він стає відомим вченим не тільки в Україні, а й у світі.

У 1995 році Георгій Євлампійович в Інституті фізики напівпровідників Національної академії наук України захистив докторську дисертацію на тему «Електричні і оптичні властивості монокристалів сульфіду кадмію з дефектами радіаційного походження».

У 1996 році йому присвоєне вчене звання професора. За вагомі наукові досягнення обирається членом Нью-Йоркської академії наук, згодом виграє міжнародний освітній грант, фінансований фондом Сороса (США).

Під керівництвом Георгія Євлампійовича у 1996 році у Волинському державному університеті імені Лесі Українки створюється перша спеціалізована вчена рада із захисту дисертацій зі спеціальності «01.04.10 – фізика напівпровідників та діелектриків». Певний час це була єдина кафедра в університеті, де працювала спеціалізована рада із захисту кандидатських, а згодом, і докторських дисертацій. Захищали дисертації у Луцьку як фізики Західної України, так і зі столиці.

Георгій Євлампійович деякий час працював на посаді проректора з наукової роботи Волинського державного університету імені Лесі Українки, де проявив себе умілим керівником та організатором наукової діяльності університету. Він також був членом редколегії кількох наукових фахових журналів, зокрема, головним редактором серії «Фізичні науки» «Наукового вісника Волинського національного університету імені Лесі Українки», членом редколегії наукового журналу «Фізика і хімія твердого тіла» Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.

Сфера наукових інтересів Георгія Євлампійовича Давидюка охоплює питання фізики структурних дефектів у напівпровідникових матеріалах. До основних наукових досягнень належить установлення механізмів утворення радіаційних дефектів і їх взаємодії з найбільш важливими технологічними домішками у халькогенідних напівпровідниках групи $A^{II}B^{VI}$. Запропоновані несуперечливі моделі дефектних комплексів радіаційного походження, відповідальні за електричні й оптичні властивості бінарних сполук $A^{II}B^{VI}$ та механізми їх перебудови під впливом зовнішніх факторів. Досліджено вплив великих скупчень (кластерів) дефектів, утворених опроміненням напівпровідників важкими високоенергетичними частинками (протонами, реакторними нейтронами) на структурні особливості кристалічної ґратки бінарних напівпровідникових сполук і параметри електричних, оптичних та фотоелектричних явищ у напівпровідниках групи $A^{II}B^{VI}$. Встановлено механізми підпорогового дефектоутворення в монокристалах CdS. В останні роки очолював групу викладачів і аспірантів, що займалися вивченням нових тетрарних халькогенідних матеріалів з нелінійними властивостями.

Професор Давидюк Г.Є. був талановитим педагогом, його лекції з фундаментальних дисциплін, таких як «Загальна фізика», «Електродинаміка» та спецкурсів: «Нерівноважні процеси в напівпровідниках», «Структура і дефекти кристалів», «Радіаційна фізика», «Фізика поверхневих явищ в напівпровідниках» відрізнялися глибоким науковим змістом, чіткістю і логічністю структури, ясністю,

доступністю викладення. Написані ним підручники і посібники до спецкурсів користуються популярністю у викладачів і студентів-фізиків багатьох університетів.

За більш ніж 40 років наукової роботи Георгій Євлампійович підготував 11 кандидатів фізико-математичних наук, опублікував понад 280 наукових праць в українських і міжнародних фахових журналах, збірниках і виданнях, із них 10 монографій і навчальних посібників, чотири патенти на винахід.

Георгій Євлампійович Давидюк був невтомним популяризатором фізичної науки. Свого часу читав публічні лекції від товариства «Знання», працював зі здібними випусками шкіл області, проводив заняття з учителями фізики Волинської області на різних курсах і методичних об'єднаннях, читав лекції з фізики для вчителів шкіл, учнів, членів Малої академії наук. На усіх своїх лекціях Георгій Євлампійович виховував у молоді любов до рідної землі, спонукав вивчати правдиву історію України, яку сам чудово знав. Любив музику, літературу, живопис, але найбільшим захопленням його були мінерали. Його колекція є однією з найкращих приватних колекцій мінералів в Україні.

Георгій Євлампійович охоче спілкувався зі студентами, бо саме це: «додає мені адреналіну в кров; без живого спілкування життя стає пісним», – казав. Залишаючись у душі ліриком, він завжди вважав природничі науки (фізика, хімія, математика) стратегічними.

За вагомий внесок у становлення і розвиток фізичної науки і освіти на Волині Георгій Євлампійович нагороджений Нагрудними знаками Міністерства освіти та науки України «Відмінник освіти України», «Петро Могила»; йому присвоєне почесне звання «Заслужений діяч науки і техніки України»; відзначений Почесними грамотами Міністерства освіти та науки України й місцевих органів управління.

У пам'яті численних учнів, колег, усіх, кому пощастило співпрацювати з ним у навчальній, адміністративній, науковій, громадській роботі Георгій Євлампійович Давидюк залишиться талановитим, енциклопедично освіченим ученим, людиною з високими моральними принципами, мудрим, доброзичливим наставником.

Він був справжнім патріотом нашої країни, одним з улюблених віршів Георгія був «Любіть Україну» Володимира Сосюри.

13 січня 2013 р. на 69-му році життя після важкої хвороби пішов із життя доктор фізико-математичних наук, заслужений діяч науки і техніки України, голова спеціалізованої вченої ради із захисту докторських дисертацій, професор кафедри фізики твердого тіла та інформаційно-вимірювальних технологій нашого університету Георгій Євлампійович Давидюк.

Викладачі, працівники, студенти й усі його учні завжди будуть пам'ятати Георгія Євлампійовича Давидюка як невтомного педагога, видатного науковця та чудову людину.

Але головне те, що живе та буде жити справа, у яку вдихнув життя Георгій Євлампійович. Для академічних інститутів м. Києва, у великій мірі завдяки його зусиллям та авторитету університет у Луцьку є одним із тих закладів освіти, що забезпечують потребу в молодих спеціалістах Національної Академії Наук України. Тому вони завжди схвалюють та підтримують ті заходи, які спрямовані на підвищення якості підготовки фахівців, у тому числі шляхом залучення до навчального процесу провідних науковців інститутів. В академічних інститутах НАН України підготовлені висококваліфіковані кадри, які повертаються на Волинь і високо тримають планку наукових досліджень. Коло замкнулося (Головіна, 2018).

Георгій Євлампійович завжди вказував на необхідність й важливість поєднання великої науково-дослідницької роботи з важкою та почесною педагогічною діяльністю, це та впровадження інноваційних методів навчання гарантує успішну діяльність колективу, його впевненість у майбутньому.

Він назавжди залишиться в серцях колег, усіх, кого звела з ним доля!

ЛІТЕРАТУРА:

1. 70 років. Фізичний факультет./ укладач Н.А. Головіна. Луцьк: ВНУ імені Лесі Українки, 2010. 40 с.
2. Головіна Н. А., Налепа А. О. Викладачі фізики на Волині в горнилі підготовки Національної Академії Наук України: штрихи до портрету. Збірник матеріалів науково-практичної конференції «Сучасна наука та освіта Волині». Луцьк. В-Волинський, 22 листопада 2018. С. 361–365.

REFERENCES:

1. 70 rokiv. Fizychnyi fakultet [70 years old. Faculty of Physics]./ compiled by N.A. Golovina. Lutsk: Lesya Ukrainka Volyn National University, 2010. 40 p.

2. Holovina, N.A., & Nalepa, A.O. (2018). Vykladachi fizyky na Volyni v hornyli pidhotovky Natsionalnoi Akademii Nauk Ukrainy: shtrykhy do portretu [Physics teachers in Volyn in the crucible of training of the National Academy of Sciences of Ukraine: touches to the portrait]. Collection of materials of the scientific and practical conference «Modern science and education in Volyn». Lutsk. V-Volynskyi, November 22, P. 361–365.

УДК 538.9
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-5

Мирон РУДИШ
кандидат фізико-математичних наук, доцент інституту фізики, Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові, ал. Армії Крайової, 13/15, Ченстохова, Польща, 42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-5431-5652*
SCOPUS-AUTHOR ID: *55858314300*

Галина МИРОНЧУК
доктор фізико-математичних наук, професор, директор навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9088-3825*
SCOPUS-AUTHOR ID: *36245422900*

Міхал ПЯСЕЦЬКИЙ
доктор габілітований, професор інституту фізики, Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові, ал. Армії Крайової, 13/15, м. Ченстохова, Польща, 42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-1040-8811*
SCOPUS-AUTHOR ID: *7004429911*

Роман МАТВІЇВ
кандидат фізико-математичних наук, молодший науковий співробітник кафедри експериментальної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, м. Львів, Україна, 79000
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-3992-5214*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57211640080*

Денис МИРОНЧУК
аспірант навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9088-3825*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57201743694*

Бібліографічний опис статті: Рудиш, М., Мирончук, Г., Пясецький, М., Матвіїв, Р., Мирончук, Д. (2024). Електронна будова і оптичні спектри кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі. *Фізика та освітні технології*, 1, 37–47, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-5

ЕЛЕКТРОННА БУДОВА І ОПТИЧНІ СПЕКТРИ КРИСТАЛА AG_3SBS_3 У МОНОКЛІННІЙ ФАЗІ

Робота присвячена теоретичному дослідженню особливостей структури, електронних станів та оптичних властивостей потрійного халькогенідного напівпровідника Ag_3SbS_3, що має кристалічну структуру з просторовою групою симетрії $P2_1/c$. Дослідження проводились з використанням методики з перших принципів. Розрахунки здійснювались у рамках теорії функціоналу густини (DFT) та формалізму Кона-Шема з використанням наближення локальної густини та узагальненого градієнтного наближення для опису обмінно-кореляційної взаємодії між електронами. З метою знаходження рівноважних параметрів ґратки та координат атомів, перед розрахунками властивостей кристала проведено геометричну оптимізацію кристалічної структури з використанням алгоритму Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шенно. Показано добре узгодження теоретично отриманих структурних параметрів кристала з експериментальними даними. Вперше проведено досліджено зонно-енергетичної структуру кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі. З'ясовано, що зонна структура E(k) характеризується відносно слабкою дисперсією рівнів зони провідності та валентної зони. Вершина валентної зони сформована

широкою смугою від 0 до –5 еВ. Заборонена зона є непрямого типу. Розрахункові значення ширини забороненої зони E_g становлять 1,1 еВ для LDA та 1,4 еВ для GGA функціоналів. З розрахунків повної та парціальної густини станів кристала проаналізовано структуру електронних рівнів досліджуваної сполуки. З'ясовано, що вершина валентної зони утворена p-станами атомів сірки та сурми. Дно зони провідності формують рівні s-стани срібла та p-стани Sb. Показано значну подібність електронної структури кристала в моноклінній фазі з тетрагональною фазою. Проведено розрахунок зарядів Міллікена та заселеності зв'язків, що підтвердило їхній іонно-ковалентний характер. Розраховано та проаналізовано оптичні спектри кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі.

Ключові слова: *напівпровідник, піраргірит, теорія функціоналу густини; зонна структура; діелектрична функція.*

Myron RUDYSH
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Częstochowa, 13/15, Armii Krajowej Al., Częstochowa, Poland, PL-42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-5431-5652*
SCOPUS-AUTHOR ID: *55858314300*

Galyna MYRONCHUK
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Director of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9088-3825*
SCOPUS-AUTHOR ID: *36245422900*

Michał PIASECKI
Doktor Habilitatus, Professor of Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Częstochowa, 13/15, Armii Krajowej Al., Częstochowa, Poland, PL-42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-1040-8811*
SCOPUS-AUTHOR ID: *7004429911*

Roman MATVIIV
Doctor of Philosophy in Physics, Junior Research Fellow of Experimental Physics Department, Ivan Franko national University of Lviv, 8 Kyrylo and Mefodii Str., Lviv, Ukraine, 79000
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-3992-5214*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57211640080*

Denis MYRONCHUK
Graduate student of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9088-3825*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57201743694*

To cite this article: Rudysh, M., Myronchuk, G., Piasecki, M., Matviiv, R., Myronchuk, D. (2024). Elektronna budova i optychni spektry krystala Ag_3SbS_3 u monoklinnii fazi [Electronic structure and optical spectra of Ag_3SbS_3 crystal in the monoclinic phase]. *Physics and Educational Technology,* 1, 37–47, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-5

ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL SPECTRA OF AG_3SBS_3 CRYSTAL IN THE MONOCLINIC PHASE

The work is devoted to the theoretical study of the features of the structure, electronic states, and optical properties of the ternary chalcogenide semiconductor Ag_3SbS_3, which has a crystal structure with a space group of symmetry $P2_1/c$. The study was conducted using the methodology from first principles. Calculations were carried out within the framework of the density functional theory (DFT) and the Kohn-Sham formalism using the local density approximation

and the generalized gradient approximation to describe the exchange-correlation interaction between electrons. In order to find the equilibrium parameters of the lattice and the atomic coordinates, before calculating the properties of the crystal, a geometric optimization of the crystal structure was carried out using the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Schenno algorithm. The theoretically obtained structural parameters of the crystal are in good agreement with the experimental data. For the first time, the band-energy structure of the Ag_3SbS_3 crystal in the monoclinic phase was studied. It was found that the E(k) band structure is characterized by a relatively weak dispersion of the conduction band and valence band levels. The top of the valence band is formed by a wide band from 0 to –5 eV. The band gap is of an indirect type. The calculated values of the band gap E_g are 1.1 eV for LDA and 1.4 eV for GGA functionals. The structure of the electronic levels of the investigated compound was analyzed from the calculations of the full and partial density of states of the crystal. It was found that the top of the valence band is formed by p-states of sulfur and antimony atoms. The bottom of the conduction band is formed by equal s-states of silver and p-states of Sb. A significant similarity between the electronic structure of the crystal in the monoclinic phase and the tetragonal phase is shown. Milliken charges and bond occupancy were calculated, which confirmed their ionic-covalent nature. The optical spectra of the Ag_3SbS_3 crystal in the monoclinic phase were calculated and analyzed.

Key words: *semiconductor, pyrargyrite, density functional theory, band structure, dielectric function.*

Вступ. Потрійні халькогенідні сполуки є важливими матеріалами, що володіють напівпровідниковими властивостями. Різноманіття їхньої структури та фізико-хімічних властивостей зумовлює їхнє практичне використання у різних областях науки і техніки. Можливість отримання цих сполук у формі моно-, полі-, нанокристалічних об'єктів розширює спектр властивостей та дозволяє їхнє ефективне використання.

Важливими підвидом потрійних халькогенідних матеріалів є кристали групи I_3-V-VI_3, де I = Ag, Cu; V = As, Sb, Bi; VI = S, Se. Цікавим представником матеріалів цієї групи є кристали піраргіриту – Ag_3SbS_3. Ця сполука може бути синтезована різними методами як кристал, тонкі плівки та наночастинки. Для росту кристалів використовують метод Бріджмена [1]. Відомо, що кристал володіє великим електрооптичним ефектом, значним двозаломленням, та слабким поглинанням в ІЧ області 0,4-15 мкм [2]. Водночас, цей кристал володіє нелінійно-оптичними властивостями (d_{eff} = 14.34 пм/В [3], d_{31} = 7.8 пм/В, та d_{22} = 8.2 пм/В @ 10.6 мкм [4]), що робить його перспективним для використання в пристроях оптоелектроніки.

Раніше у роботі [5] нами досліджувався кристал Ag_3SbS_3 у тригональній симетрії 3*m*. Отримано монокристал методом Бріджмена-Стокбаргера та досліджено його кристалічну структуру, електронні, оптичні властивості. З'ясовано, що матеріал володіє забороненою зоною непрямого типу, а експериментальна ширина забороненої зони становить 1,91 еВ [5]. Водночас повідомляється, що кристал Ag_3SbS_3 може перебувати в іншій фазі з моноклінною сингонією [6]. Властивостям цієї кристалічної фази сполуки не приділяється значна увага науковців, тому такі дослідження є актуальним та цікавими.

Робота присвячена теоретичному вивченню зонно-енергетичної структури, особливостей хімічного зв'язку та оптичних спектрів кристала Ag_3SbS_3 у фазі з моноклінною симетрією за допомогою першопринципних розрахунків в рамках теорії функціоналу густини (DFT).

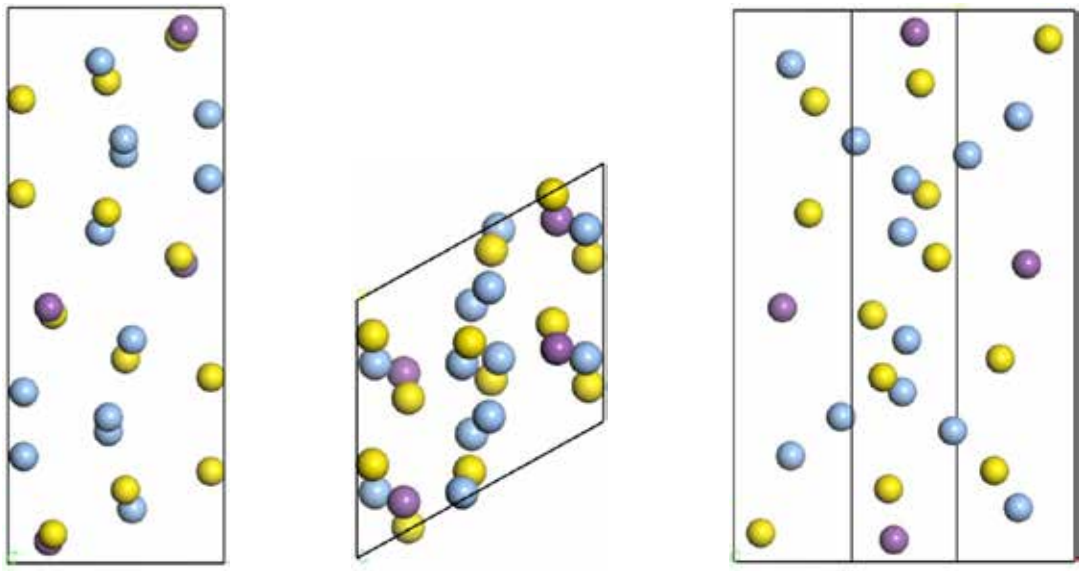
Методика розрахунків. У роботі проведено першопринципні розрахунки електронної структури та властивостей з використанням програми CASTEP (CAmbridge Serial Total Energy Package) [7]. Програма базується на теорії функціоналу густини (DFT) [8]. Для опису валентних електронів досліджуваної системи використано наступну електронну конфігурацію: S $3s^2$ $3p^4$; Ag $4d^{10}$ $5s^1$; Sb $5s^2$ $5p^3$. Врахування квантових ефектів обміну та кореляції здійснено в рамках наближення локальної густини (LDA) з параметризацією Цаперлі-Алдера Пердю-Зунгера (CA-PZ) [9, 10] та узагальненого градієнтного наближення (GGA) [11] з параметризацією Пердю-Бурке-Ернзергофа (PBE) [11, 12]. Електрон-іонна взаємодія описувалась з допомогою ультрамякого псевдопотенціала Вандербільта [13]. Інтегрування проводилось по *k*-сітці першої зони Бріллюена розміром 8×6×9. Енергія відсікання плоских хвиль E_{cut} становила 500 еВ. Геометрична оптимізація проводилась з використанням BFGS алгоритму [14], для якої застосовувано такі параметри збіжності: енергія – $5 \cdot 10^{-6}$ еВ/атом; максимальна сила – 10^{-2} еВ/Å; максимальний тиск – $2 \cdot 10^{-2}$ ГПа; максимальне зміщення – $5 \cdot 10^{-4}$ Å.

Результати та обговорення

Кристалічна структура. Для проведення розрахунків електронної структури та оптичних властивостей використовувались кристалографічні дані отримані з роботи [6]. Кристалічна ґратка належить до моноклінної симетрії з просторовою групою симетрії $P2_1/c$, та містить 28 іонів в комірці. Зображення проєкції кристалічної ґратки у площинах *xy*, *xz* та *yx* представлено на рис. 1.

Експериментальні параметри кристалічної ґратки та координати атомів сполуки Ag_3SbS_3 взяті з роботи [6] зібрано у таблиці 1 та 2. Перед розрахунками фізичних властивостей досліджуваного кристала проводилась геометрична оптимізація його структури методом BFGS [14]. Вона включала релаксацію параметрів ґратки, а також знаходження рівноважних координат атомів у комірці. Оптимізовані з використанням LDA та GGA функціоналів параметри кристалічної ґратки та відносні координати атомів зібрано в табл. 1 і 2.

Як видно з таблиці, оптимізовані параметри ґратки є досить близькими до експериментальних. Спостерігається добре відома залежність, що LDA функціонал занижує параметри ґратки, тоді як використання GGA приводить до їх завищення [15–17]. Для досліджуваного кристала недооцінка параметрів ґратки для LDA функціонала становить δa = 1,9 %, δb = 4,3 %, δc = 1,58%, тоді як для GGA функціонала завищення є таким: δa = 3,4 %, δb = 0,4 % та δc = 2 %. Малі значення відхилення теоретичних параметрів (менше 5 %) свідчать про їхнє добре узгодження з експериментальними даними роботи [6]. Також варто зазначити, що оптимізована двома методами структура має дещо більше за експериментальне значення кута β.



а) б) в)

Рис. 1. Кристалічна структура кристала Ag_3SbS_3: а) площина *xy*; б) площина *xz*; в) площина *yz*

Таблиця 1

Експериментальні [6] та оптимізовані з використанням LDA та GGA функціоналу кристалографічні параметри кристала Ag_3SbS_3 у моноклинній фазі

Параметр	Експ. [6]	LDA	GGA
a, Å	6,8400	6,7079	7,07769
b, Å	15,8400	15,1532	15,9037
c, Å	6,2400	6,1410	6,3684
V, Å^3	601,583	546,077	631,79
α, °	90	90	90
β, °	117,15	118,976	118,194
γ, °	90	90	90

Таблиця 2

Експериментальні [6] та оптимізовані з використанням LDA та GGA функціоналу відносні координати атомів у комірці кристала Ag_3SbS_3

Атом	Експ. [6]			LDA			GGA		
	x/a	*y/b*	*z/c*	*x/a*	*y/b*	*z/c*	*x/a*	*y/b*	*z/c*
Ag1	0.0358	0.3147	0.2658	0.0724	0.3080	0.2836	0.0623	0.3093	0.2638
Ag2	0.4698	0.2413	0.2804	0.4646	0.2373	0.2650	0.4740	0.2423	0.2834
Ag3	-0.4038	0.0934	0.0528	-0.4259	0.0977	0.0292	-0.4129	0.0976	0.0562
Sb	0.1972	0.0522	0.3749	0.1887	0.0396	0.3824	0.1947	0.0495	0.3629
S1	0.2210	0.0570	-0.0100	0.2066	0.0521	-0.0114	0.2157	0.0566	-0.0193
S2	-0.4590	0.1350	0.5920	-0.4559	0.1319	0.5946	-0.4678	0.1356	0.5869
S3	-0.0490	0.1670	0.3250	-0.0611	0.1651	0.3297	-0.0557	0.1662	0.3135

Електронна структура та аналіз хімічних зв'язків. Електронна структура кристала отримувалась використовуючи теорію функціоналу густини, розв'язуючи рівняння Кона-Шема [18]. Зонна діаграма *E*(k) розраховувалась вздовж ліній, що з'єднують точки високої симетрії першої зони Бріллюена (рис. 2).

Оскільки зонно-енергетична структура отримана з використанням LDA функціоналу якісно не відрізняється від отриманої з GGA, у роботі головно розглядатимуться результати отримані з градієнтним наближенням.

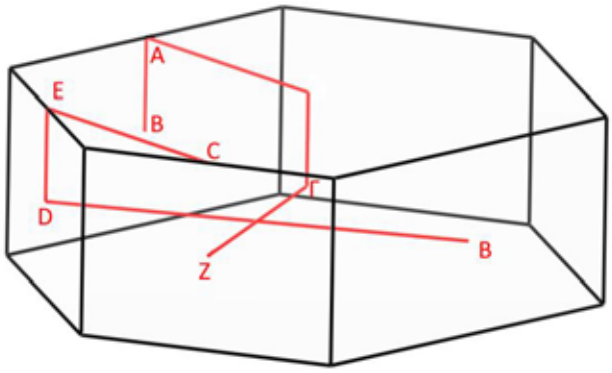
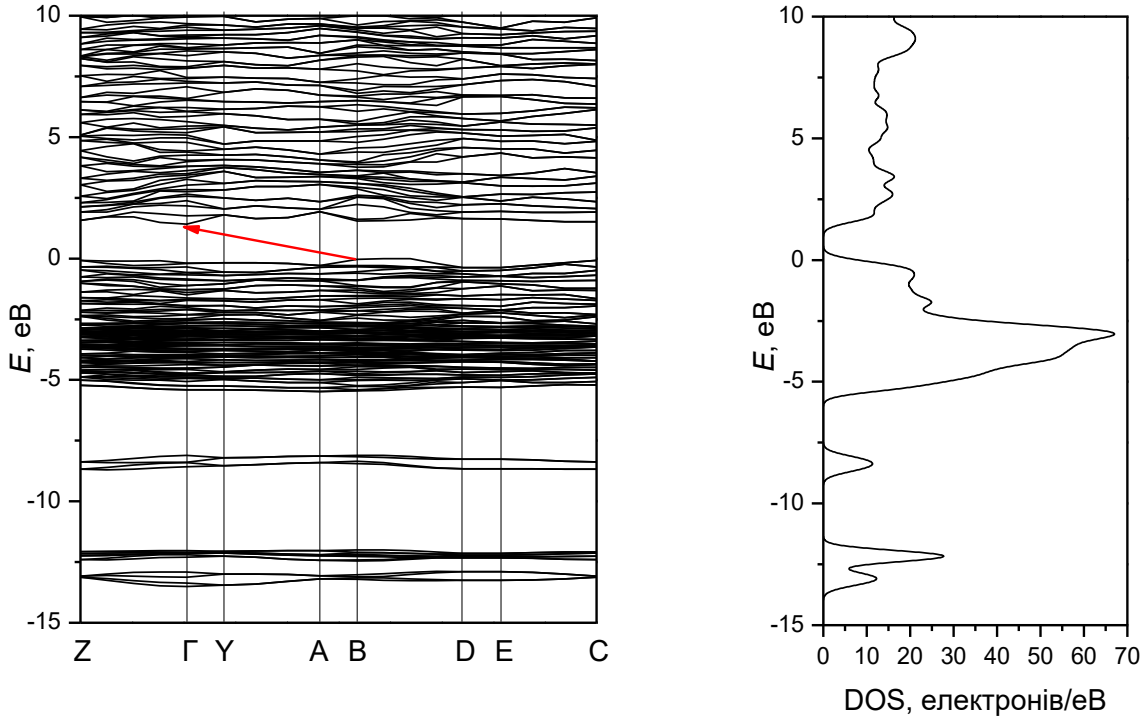


Рис. 2. Структура першої зони Бріллюена для кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі

На рис. 3 (а) зображено зонно-енергетичну структуру кристала Ag_3SbS_3 отриману з використанням GGA функціоналу. Розраховані значення ширини забороненої зони кристала становлять E_g = 1,1 еВ для LDA та 1,4 еВ для використання GGA функціоналу. Заборонена зона кристала Ag_3SbS_3 є не прямого типу. Дно зони провідності розташоване в центрі зони Бріллюена (точка Г), тоді як вершина валентної зони знаходиться в точці В. Досліджена раніше зонна структура кристала Ag_3SbS_3 з просторовою групою симетрії 3*m* (тригональна симетрія) також володіє забороненою зоною непрямого типу, однак вершина валентної зони знаходиться в центрізони Бріллюена, а дно зони провідності локалізоване у точці M [5]. Також, розрахована у цій роботі ширина забороненої зони є більшою за значення отримані раніше для кристала в тригональній симетрії (0,35 еВ, для LDA та 0,88 для GGA функціонала [5]).

Як видно з рисунка, для залежності *E*(k) досліджуваного кристала притаманна незначна дисперсія. Рівні зони провідності представлені широкою смугою, що формується сукупністю електронних рівнів (підрівнів), що перекриваються між собою у всьому досліджуваному діапазоні енергій (від 1,4 еВ до 10 еВ). За початок відліку по енергетичній шкалі взято 0 еВ, що є співставленим з рівнем Фермі та суміщеним з вершиною валентної зони. З рисунка видно, що валентна зона утворена широкою смугою рівнів, що формують енергетичну ділянку від 0 до –5 еВ. Рівні валентної зони володіють подібною дисперсією до рівнів зони провідності. Нижчі енергетичні рівні характеризуються локалізованістю, та формують вузькі в'язки кількох електронних рівнів. За енергії –8 еВ знаходиться вузька смуга, що на спектрі повної густини станів представлена піком незначної інтенсивності (рис. 3 б), яка розділена проміжком забороненої енергії від –5 до –8 еВ. Наступна підзона, яка розташована за нижчих енергій є розділеною забороненою областю енергій від –8,8 до –11,9 еВ. Ця підзона сформована двома близько розташованими смугами, що на DOS відповідають двом пікам з максимумами за –12,2 еВ та –13,2 еВ. Порівнюючи структуру валентної зони з кристалом Ag_3SbS_3



а) б)

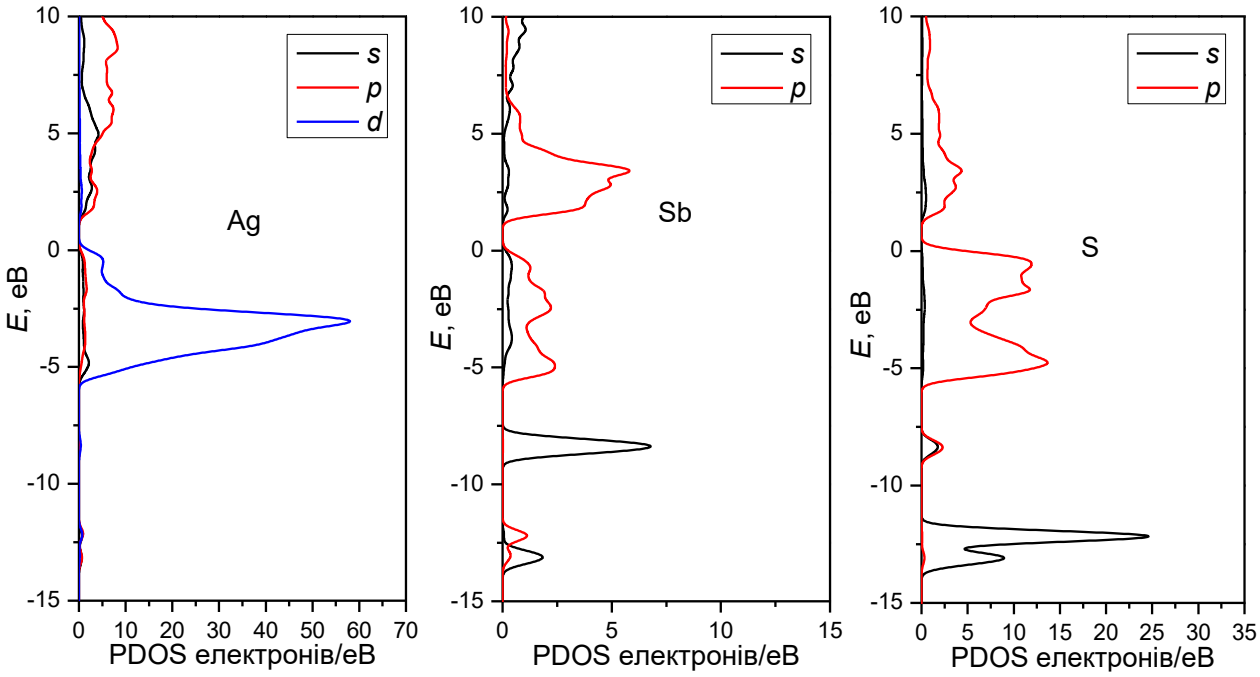
Рис. 3. Зонно-енергетична структура кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі розрахована з використанням GGA-функціонала

у тригональній симетрії, можна зауважити, що вузькі рівні за –8 еВ, –12,2 еВ та –13,2 еВ є дещо зсунутими в бік менших енергій.

З метою детальнішого аналізу походження електронних рівнів здійснено розрахунок парціальний внесків у повну густину електронних станів. На рис. 4 зображено парціальну густину електронних станів (PDOS) для досліджуваної сполуки. Рис. 4 а відповідає парціальним внескам станів срібла у електронний спектр. З рисунка видно, що внески атомів срібла у валентну зону представлені широкою смугою *d*-станів розташованою від приблизно 0 до –6 еВ, тобто формують смугу поблизу вершини валентної зони. У зоні провідності стани срібла представлені *s*- та *p*-станами, які утворюють широкі смуги, формуючи дно зони провідності. Стани Sb в електронному спектрі представлені широкими смугами від приблизно 0 до –5 еВ, що відповідають *s*- та *p*-електронам. Смуга за енергії –8,4 еВ утворена *s*-електронами атомів Sb. В зоні провідності *p*-стани сурми формують смугу за енергій від 1,5 еВ до 5 еВ, тоді як внесок *s*-електронів невеликий та зростає за енергій більше 5 еВ. Значний внесок у верхню частину валентної зони дають *p*-стани сірки. Вони формують вершину валентної зони та по енергії перекриваються з *d*-станами Ag та *p*-станами Sb. Як видно з рисунка, широка смуга *p*-електронів сірки знаходиться в діапазоні енергій від 0 до –6 еВ. *s*-стани атомів сірки формують пік за енергії –12,2 еВ. Внесок станів сірки в зону провідності виражений, головно, *p*-електронами в області енергій 1,4 – 5 еВ, що також можуть формувати її дно.

Аналіз зарядів Міллікена дозволяє оцінити хімічний зв'язок між атомами та його відносну силу. Вивчення абсолютних значень зарядів дозволяє оцінити, який тип хімічного зв'язку є переважаючим у кристалічній структурі. Заряди Міллікена та орбітальні заряди для кристала Ag_3SbS_3, розраховані з використанням LDA- та GGA-функціонала, зібрано у таблиці 3. З таблиці видно часткове перенесення зарядів, що свідчить про змішаний іонно-ковалентний тип хімічного зв'язку. Отримні у цій роботі заряди добре узгоджуються з даними попередньої роботи [5], що свідчить про подібний характер взаємодії між атомами.

У таблиці 4 зібрано результати розрахунку заселеностей хімічних зв'язків та їхні довжини для кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній



а) б) в)

Рис. 4. Парціальна густина станів кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі розрахована з використанням GGA-функціонала

Таблиця 3

Атомні заселеності (за Міллікеном) розраховані для кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі з використанням LDA/GGA-функціоналів

Атом	*s*	*p*	*d*	Повний	Заряд (*e*)
Ag1	0.57/0.55	0.56/0.45	9.80/9.85	10.9410.85	0.06/0.15
Ag2	0.58/0.60	0.60/0.53	9.80/9.83	10.98/10.96	0.02/0.04
Ag3	0.56/0.54	0.72/0.59	9.82/9.86	11.09/10.99	–0.09/0.01
Sb	1.53/1.54	2.44/2.40	0.00/0.00	3.97/3.94	1.03/1.06
S1	1.85/1.87	4.51/4.57	0.00/0.00	6.36/6.44	–0.36/–0.44
S2	1.86/1.87	4.49/4.54	0.00/0.00	6.34/6.42	–0.34/–0.42
S3	1.84/1.86	4.49/4.55	0.00/0.00	6.32/6.40	–0.32/–0.40

Таблиця 4

Заселеності перекриття зв'язків і довжини зв'язків (в Å) для кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі розраховані за допомогою LDA/GGA-функціоналів

Зв'язок	Заселеність	Довжина
Ag1 – S	0,40/0,38	2,44325/2,53240
Ag2 – S	0,43/0,45	2,42199/2,45173
Ag3 – S	0,32/0,28	2,57023/2,70513
Sb – S	0,16/0,33	2,58366/2,50684

фазі. Як видно з таблиці, для атомів срібла найменші заселеність спостерігається для хімічних зв'язків Ag3 – S, що становить 0,32 та 0,28 для LDA та GGA, відповідно. Водночас, для атомів Ag1 і Ag2 заселеність є на приблизно 30 % більшою. Варто зазначити, що порівняно з кристалом в тригональній симетрії, моноклінна структура кристала Ag_3SbS_3 володіє більшими довжинами зв'язків Ag – S, що вказує на більшу їхню іонність. Найменша заселеність отримана для Sb – S зв'язку, що становить 0,16 та 0,33 отримана для LDA і GGA методів, відповідно. Це вказує на те, що обидва зв'язки в сполуці володіють

значною часткою іонності. Довжина зв'язка Sb – S перебуває в доброму узгодженні з результатами отриманими в роботі [5] для сполуки в тригональній симетрії. Таким чином, в моноклінній структурі можна очікувати слабше зв'язання іонів срібла з атомами сірки, що буде приводити до зростання їхньої рухливості і, як наслідок, може приводити до збільшення іонної провідності.

Оптичні спектри. В рамках теорії функціоналу густини також проведено розрахунок оптичних функцій кристала Ag_3SbS_3 із моноклінною симетрією. Уявна частина діелектричної функції ε_2 отримувалась з рівняння [19]

$$\mu_2(\hbar\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega\varepsilon_0}\sum_{k,v,c}\left|\left\langle\psi_k^c\left|ur\right|\psi_k^v\right\rangle\right|^2\delta\left(E_k^c - E_k^v - E\right), \quad (1)$$

де E – енергія фотона; u – вектор поляризації падаючого фотона; ψ_k^c і ψ_k^v – хвильові функції у k-просторі, що відповідають станам валентної зони та зони провідності, відповідно; Ω – об'єм ґратки кристала; e – заряд електрона; ε_0 – діелектрична стала; r – оператор координати електрона; ω – частота фотона.

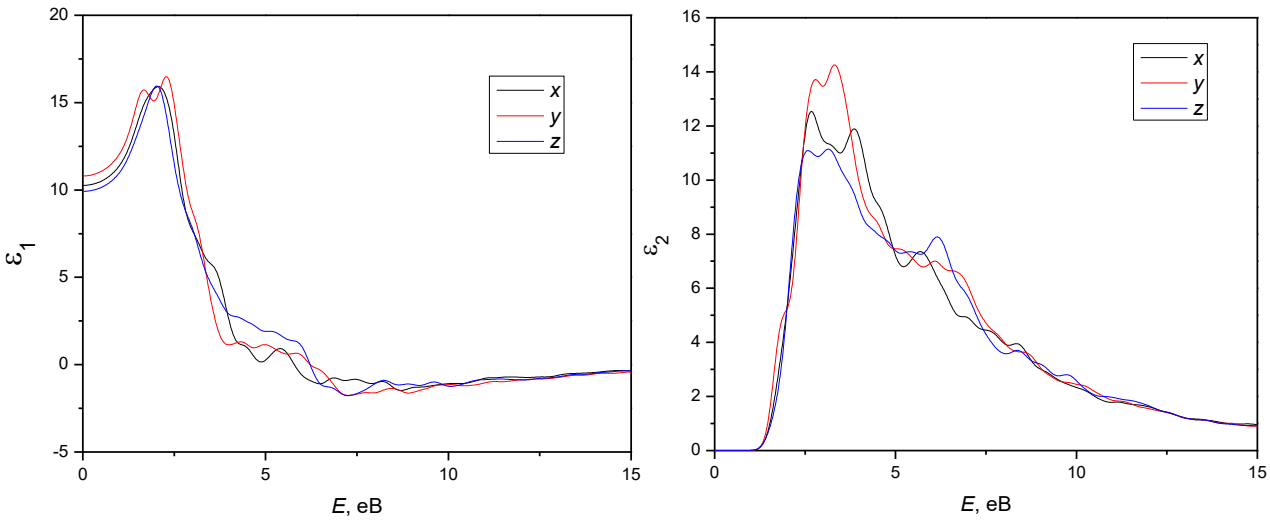
Дійсна частина діелектричної функції отримувалась із спектра уявної частини діелектричної функції використовуючи відоме рівняння Крамерса-Кроніга [20]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\varepsilon_2(\omega')\omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}. \quad (2)$$

Розраховані дійсна та уявна частини діелектричної функції кристала Ag_3SbS_3 зі структурою моноклінної симетрії зображені на рисунку 5. Згідно із симетрією кристала, оптична індикатриса описується трьома компонентами діелектричного тензора: ε_x, ε_y та ε_z. Тому розрахунковий спектр містить три відмінні діелектричні функції, що відповідають кристалографічним напрямкам X, Y, Z.

Рисунок 5 містить дійсну і уявну компоненти діелектричної функції в енергетичному діапазоні від 0 до 15 еВ. Можна побачити, що дійсна частина діелектричної функції ε_1 за малих значень енергії плавно зростає, до енергії ~1,5 еВ, що відповідає краю фундаментального поглинання кристала. Ця спектральна область відповідає оптичній прозорості кристала. За більших енергій спостерігається серія піків, що відповідає зона-зонним переходам електронів. В подальшому, зростання енергії фотона приводить до зменшення діелектричної функції. Статичні значення діелектричної функції становлять: 10,27 – для напряму X, 10,79 – для напрямку Y; 9,88 – для напрямку Z. Відповідні значення статичної діелектричної функції є дещо вищими за кристал Ag_3SbS_3 в тригональній фазі, що є, ймовірно пов'язаним з більшим значенням E_g.

Рисунок 5 б відображає спектральну залежність уявної частини діелектричної функції ε_2. Малі значення енергії фотона відповідають



а) б)

Рис. 5. Дійсна та уявна частини діелектричної функції кристала Ag_3SbS_3, розраховані за допомогою GGA-функціонала

рівності нулю уявної частини діелектричної функції. Значне зростання ε_2 спостерігається за досягнення енергії рівної значенню ширини забороненої зони, що відповідає першій смузі поглинання кристала.

Висновки. Вперше в рамках теорії функціоналу густини проведено теоретичне вивчення оптико-електронних властивостей кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі. Використовуючи в якості початкових даних експериментальні результати дослідження кристалічної структури, отримані іншими авторами, проведено геометричну оптимізацію ґратки кристала методом BFGS. З'ясовано, що оптимізовані з використанням LDA функціонала параметри гратки є заниженими (δa = 1,9 %, δb = 4,3 %, δc = 1,58%) а з використанням GGA функціонала завищеними (δa = 3,4 %, δb = 0,4 % та δc = 2 %). Та показують добре узгодження з експериментальними даними.

Розрахована $E(k)$ дозволила встановити значення ширини забороненої зони, що становлять 1,1 еВ і 1,4 еВ для LDA та GGA функціоналу, відповідно. Показано, що заборонена зона кристала у моноклінній фазі, як і в тригональній, є не прямого типу, однак перехід електрона з валентної зони в зону провідності відповідає точкам зони Бріллюена В → Г, тоді як для тригонального кристала – Г → М. Проведено аналіз походження електронних рівнів та з'ясовано внески окремих атомів у повну густину електронних станів кристала. Показано незначний зсув найнижчих рівнів валентної зони в бік менших енергій порівняно з тригональною фазою кристала.

Розраховано спектри діелектричної функції кристала Ag_3SbS_3 у моноклінній фазі для діапазону енергій 0-15 еВ. Показано, що оптичні спектри мають три незалежні напрямки та володіють анізотропією. З'ясовано, що статичні значення діелектричної функції рівні 10,27 (для напряму *X*), 10,79 (для напрямку *Y*) та 9,88 (для напрямку *Z*), і є дещо вищими за кристал Ag_3SbS_3 в тригональній фазі.

Подяки. Частина результатів, представлених у цій роботі, отримана за підтримки проєкту молодих вчених 0123U100599 Міністерства освіти і науки України та Національного центру науки Польщі, грант № NCN 2018/31/B/ST4/00924. (This work was partially supported by the National Science Centre (NCN), Poland, grant number: NCN 2018/31/B/ST4/00924.).

ЛІТЕРАТУРА:

1. Schönau K. A., Redfern S. A. T. High-temperature phase transitions, dielectric relaxation, and ionic mobility of proustite, Ag_3AsS_3, and pyrargyrite, Ag_3SbS_3, *Journal of Applied Physics.* 2002. 92 P. 7415–7424.
2. Gandrud W. B., Boyd G. D., McFee J. H., Wehmeier F. H. Nonlinear optical properties of Ag_3SbS_3, *Appl. Phys. Lett*. 1970. 16. P. 59–61.
3. Petrov V., Noack F., Tunchev I., Schunemann P., Zawilski K. The nonlinear coefficient d_{36} of $CdSiP_2$, in: Nonlinear Frequency Generation and Conversion: *Materials, Devices, and Applications VIII, SPIE*, 2009. P. 157–164.
4. Dmitriev V. G., Gurzadyan G. G., Nikogosyan D. N., Handbook of Nonlinear Optical Crystals, *Springer*, Berlin, Heidelberg, 1999. P. 1–2.
5. Rudysh M. Ya., Myronchuk G. L., Fedorchuk A. O., Marchuk O. V., Kordan V. M., Kohan O. P., Myronchuk D. B., Smitiukh O. V. Electronic structure and optical properties of the Ag_3SbS_3 crystal: experimental and DFT studies, *Phys. Chem. Chem. Phys*. 2023. 25. P. 22900–22912.
6. Kutoglu A. Die Struktur des Pyrostilpnits (Feuerblende) Ag_3SbS_3., *Phase Transition.* 1992. 38. P. 127–120.
7. Segall M. D., Lindan P. J. D., Probert M. J., Pickard C. J., Hasnip P. J., Clark S. J., Payne M. C. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code, *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002. 14. P. 2717–2744.
8. Lee J. G. Computational Materials Science: An Introduction, accessed October 1, 2020).
9. Ceperley D. M., Alder B. J. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, *Phys. Rev. Lett.* 1980. 45. P. 566–569.
10. Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 1981. 23. P. 5048–5079.
11. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.* 1996. 77. P. 3865–3868.
12. Perdew J. P., Ruzsinszky A., Csonka G. I., Vydrov O. A., Scuseria G. E., Constantin L. A., Zhou X., Burke K. Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces, *Phys. Rev. Lett*. 2008. 100. P. 136406.

13. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism, *Phys. Rev. B*. 1990. 41. P. 7892–7895.

14. Pfrommer B. G., Côté M., Louie S. G., Cohen M. L. Relaxation of Crystals with the Quasi-Newton Method, *Journal of Computational Physics.* 1997. 131. P. 233–240.

15. Rudysh M. Ya., Shchepanskyi P. A., Fedorchuk A. O., Brik M. G., Stadnyk V. Yo., Myronchuk G. L., Kotomin E. A., Piasecki M. Impact of anionic system modification on the desired properties for $CuGa(S_{1-x}Se_x)_2$ solid solutions, *Computational Materials Science*. 2021. 196. P. 110553.

16. Kashuba A. I., Piasecki M., Bovgyra O. V., Stadnyk V. Yo., Demchenko P., Fedorchuk A., Franiv A. V., Andriyevsky B. Specific Features of Content Dependences for Energy Gap in In_xTl_{1-x} I Solid State Crystalline Alloys, *Acta Phys. Pol. A*. 2018. 133. P. 68–75.

17. Ilchuk H., Andriyevsky B., Kushnir O., Kashuba A., Semkiv I., Petrus R., Electronic band structure of cubic solid-state $CdTe_{1-x}Se_x$ solutions, *Ukr. J. Phys. Opt.* 2021. 22. P. 101–109.

18. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Phys. Rev.* 1965. 140. P. A1133–A1138.

19. Chrunik M., Majchrowski A., Ozga K., Rudysh M. Ya., Kityk I. V., Fedorchuk A. O., Stadnyk V. Yo., Piasecki M. Significant photoinduced increment of reflectivity coefficient in $LiNa_5Mo_9O_{30}$, *Current Applied Physics*. 2017. 17. P. 1100–1107.

20. Fox M. Optical Properties of Solids, Second Edition, *Oxford University Press*, Oxford, New York, 2010.

REFERENCES:

1. Schönau, K.A., & Redfern, S.A.T. (2002). High-temperature phase transitions, dielectric relaxation, and ionic mobility of proustite, Ag_3AsS_3, and pyrargyrite, Ag_3SbS_3, *Journal of Applied Physics.* 92 P. 7415–7424.

2. Gandrud, W.B., Boyd, G.D., McFee, J.H., & Wehmeier, F.H. (1970). Nonlinear optical properties of Ag_3SbS_3, *Appl. Phys. Lett*. 16. P. 59–61.

3. Petrov, V., Noack, F., Tunchev, I., Schunemann, P., & Zawilski, K. (2009). The nonlinear coefficient d_{36} of $CdSiP_2$, in: Nonlinear Frequency Generation and Conversion: *Materials, Devices, and Applications VIII, SPIE*, P. 157–164.

4. Dmitriev, V.G., Gurzadyan, G.G., & Nikogosyan, D.N. (1999). Handbook of Nonlinear Optical Crystals, *Springer*, Berlin, Heidelberg, P. 1–2.

5. Rudysh, M.Ya., Myronchuk, G.L., Fedorchuk, A.O., Marchuk, O.V., Kordan, V.M., Kohan, O.P., Myronchuk, D.B., & Smitiukh, O.V. (2023). Electronic structure and optical properties of the Ag_3SbS_3 crystal: experimental and DFT studies, *Phys. Chem. Chem. Phys*. 25. P. 22900–22912.

6. Kutoglu, A. (1992). Die Struktur des Pyrostilpnits (Feuerblende) Ag_3SbS_3., *Phase Transition.* 38. P. 127–120.

7. Segall, M.D., Lindan, P.J.D., Probert, M.J., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Clark, S.J., & Payne, M.C. (2002). First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code, *J. Phys.: Condens. Matter*. 14. P. 2717–2744.

8. Lee, J.G. Computational Materials Science: An Introduction, accessed October 1, 2020.

9. Ceperley, D.M., & Alder, B.J. (1980). Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, *Phys. Rev. Lett.* 45. P. 566–569.

10. Perdew, J.P., & Zunger, A. (1981). Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 23. P. 5048–5079.

11. Perdew, J.P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.* 77. P. 3865–3868.

12. Perdew, J.P., Ruzsinszky, A., Csonka, G.I., Vydrov, O.A., Scuseria, G.E., Constantin, L.A., Zhou, X., & Burke, K. (2008). Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces, *Phys. Rev. Lett*. 100. P. 136406.

13. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism, *Phys. Rev. B.* 41. P. 7892–7895.

14. Pfrommer, B.G., Côté, M., Louie, S.G., & Cohen, M.L. (1997). Relaxation of Crystals with the Quasi-Newton Method, *Journal of Computational Physics.* 131. P. 233–240.

15. Rudysh, M.Ya., Shchepanskyi, P.A., Fedorchuk, A.O., Brik, M.G., Stadnyk, V.Yo., Myronchuk, G.L., Kotomin, E.A., & Piasecki, M. (2021). Impact of anionic system modification on the desired properties for $CuGa(S_{1-x}Se_x)_2$ solid solutions, *Computational Materials Science*. 196. P. 110553.

16. Kashuba, A.I., Piasecki, M., Bovgyra, O.V., Stadnyk, V.Yo., Demchenko, P., Fedorchuk, A., & Franiv, A.V. (2018). Andriyevsky B., Specific Features of Content Dependences for Energy Gap in In_xTl_{1-x} I Solid State Crystalline Alloys, *Acta Phys. Pol. A*. 133. P. 68–75.

17. Ilchuk, H., Andriyevsky, B., Kushnir, O., Kashuba, A., Semkiv, I., & Petrus, R. (2021). Electronic band structure of cubic solid-state $CdTe_{1-x}Se_x$ solutions, *Ukr. J. Phys. Opt.* 22. P. 101–109.

18. Kohn, W., & Sham, L.J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Phys. Rev.* 140. P. A1133–A1138.

19. Chrunik, M., Majchrowski, A., Ozga, K., Rudysh, M.Ya., Kityk, I.V., Fedorchuk, A.O., Stadnyk, V.Yo., & Piasecki, M. (2017). Significant photoinduced increment of reflectivity coefficient in $LiNa_5Mo_9O_{30}$, *Current Applied Physics*. 17. P. 1100–1107.

20. Fox, M. (2010). Optical Properties of Solids, Second Edition, *Oxford University Press*, Oxford, New York.

УДК 538.9
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-6

Мирон РУДИШ
кандидат фізико-математичних наук, доцент інституту фізики, Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові, ал. Армії Крайової, 13/15, м. Ченстохова, Польща, 42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-5431-5652*
SCOPUS-AUTHOR ID: *55858314300*

Міхал ПЯСЕЦЬКИЙ
доктор габілітований, професор інституту фізики, Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові, ал. Армії Крайової, 13/15, м. Ченстохова, Польща, 42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-1040-8811*
SCOPUS-AUTHOR ID: *7004429911*

Андрій КАШУБА
кандидат фізико-математичних наук, докторант, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Україна, 79000
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-3650-3892*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57188864596*

Владислав КАРНАУШЕНКО
доктор філософії з фізики, молодший науковий співробітник кафедри експериментальної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, м. Львів, Україна, 79000
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9739-9809*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57221495764*

Бібліографічний опис статті: Рудиш, М., Пясецький, М., Кашуба, А., Карнаушенко, В. (2024). Першопринципні дослідження електронної будови кристала $TlSbSe_2$. *Фізика та освітні технології*, 1, 48–56, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-6

ПЕРШОПРИНЦИПНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ БУДОВИ КРИСТАЛА $TlSbSe_2$

У роботі проведено дослідження електронної структури кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі з перших принципів. Дослідження структури електронних рівнів у даному кристалі раніше не проводились, тому такі дослідження є важливими та актуальними з огляду на можливість його потенційного практичного застосування. Для моделювання властивостей кристала використано програму CASTEP, що базується теорії Кона-Шема. В якості наближення, для опису обмінно-кореляційної взаємодії використано узагальнене градієнтне наближення з параметризацією Пердю-Бурке-Ернзергофа. Енергія плоских хвиль обмежувалась значенням 450 еВ. З метою отримання структури в основному стані попередньо проводилась геометрична оптимізація кристалічної ґратки з використанням методу Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шенно. Вперше проведено геометричну оптимізацію кристалічної структури та з'ясовано, що найкраще узгодження з експериментальними результатами дає параметр ґратки a (відхилення δa = 0,6%). Максимальне відхилення оптимізованого параметра ґратки від експериментального значення отримане для параметра c і становить 4,8%. З аналізу кристалічної ґратки показано також збільшення кута β на 30′ при застосуванні GGA функціоналу. Вперше розраховано зонно-енергетичну структура кристала $TlSbSe_2$ у структурі моноклінної симетрії. З її аналізу показано, що зона провідності та вершина валентної зони кристала утворені широкими смугами. Дно зони провідності знаходиться на сегменті Γ → Y першої зони Бріллюена. Вершина валентної зони розташована в точці Z утворюючи заборонену зону не прямого типу. Розраховане значення E_g становить 0,99 еВ. З'ясовано, що зона провідності утворена s- та p-станів атомів Tl, Sb та Se а вершина валентної зони формується s-станами сурми та p-станами селену. Найінтенсивніший пік у спектрах DOS/PDOS відповідає локалізованим d-станам атомів Tl.

Ключові слова: *напівпровідник, теорія функціоналу густини; халькогенід, зонна структура; діелектрична функція.*

Myron RUDYSH
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Częstochowa, 13/15, Armii Krajowej Al., Częstochowa, Poland, PL-42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-5431-5652*
SCOPUS-AUTHOR ID: *55858314300*

Michał PIASECKI
Doktor Habilitatus, Professor of Institute of Physics, Jan Dlugosz University in Częstochowa, 13/15, Armii Krajowej Al., Częstochowa, Poland, PL-42-200
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-1040-8811*
SCOPUS-AUTHOR ID: *7004429911*

Andrii KASHUBA
Candidate of Physical and Mathematical Sciences, doctoral student Lviv Polytechnik National University, 12 Banders Str., Lviv, Ukraine, 79000
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-3650-3892*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57188864596*

Vladyslav KARNAUSHENKO
Doctor of Philosophy in Physics, Junior Research Fellow of Experimental Physics Department, Ivan Franko national University of Lviv, 8 Kyrylo and Mefodii Str., Lviv, Ukraine, 79000
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-9739-9809*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57221495764*

To cite this article: Rudysh, M., Piasecki, M., Kashuba, A., Karnaushenko, V. (2024). Pershopryntsypni doslidzhennia elektronnoi budovy krystala $TlSbSe_2$ [Ab-initio studies of the electronic structure of the $TlSbSe_2$ crystal]. *Physics and Educational Technology,* 1, 48–56, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-6

AB-INITIO STUDIES OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE $TlSbSe_2$ CRYSTAL

The paper investigates the electronic structure of the $TlSbSe_2$ crystal in the monoclinic phase from the first principles. Studies of the structure of electronic levels in this crystal have not been carried out before, so such studies are important and relevant in view of the possibility of its potential practical application. The CASTEP program, based on the Kohn-Sham theory, was used to model the properties of the crystal. As an approximation, the generalized gradient approximation with Perdue-Burke-Ernzerhoff parameterization was used to describe the exchange-correlation interaction. The plane wave energy was limited to 450 eV. In order to obtain the structure in the ground state, the geometric optimization of the crystal lattice was previously carried out using the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno method. For the first time, the geometric optimization of the crystal structure was carried out and it was found that the best agreement with the experimental results is given by the lattice parameter a (deviation δa = 0.6%). The maximum deviation of the optimized lattice parameter from the experimental value obtained for parameter c is 4.8%. The analysis of the crystal lattice also shows an increase in the β angle by 30′ when the GGA functional is used. The band-energy structure of the $TlSbSe_2$ crystal in the structure of monoclinic symmetry was calculated for the first time. Its analysis shows that the conduction band and the top of the valence band of the crystal are formed by wide bands. The bottom of the conduction band is located on the segment $\Gamma \rightarrow Y$ of the first Brillouin zone. The top of the valence band is located at point Z, forming a forbidden band of a non-direct type. The calculated value of E_g is 0.99 eV. It was found that the conduction band is formed by s- and p-states of Tl, Sb, and Se atoms, and the top of the valence band is formed by s-states of antimony and p-states of selenium. The most intense peak in the DOS/PDOS spectra corresponds to localized d-states of Tl atoms.

Key words: *semiconductor, density functional theory, chalcogenide, band structure, dielectric function.*

Вступ. Напівпровідникові матеріали групи $A^{III}B^{V}C_2^{IV}$ є цікавими об'єктами дослідження та привертають значну увагу науковців через їхні фізичні властивості. Відомо, що представники цієї групи є перспективними матеріалами для використання в термоелектриці, електрооптиці, сенсориці, оптоелектроніці, володіють надпровідністю тощо. Потенціал практичного використання матеріалів вказаної групи зумовлює актуальність їхнього дослідження як

експериментальними, так і теоретичними методами. Сполука $TlSbSe_2$ є представником цієї групи матеріалів. Її отримують як у вигляді тонких плівок, так і моно/полі кристалів. У роботі [1], методом термічного випаровування синтезовано плівки сполуки $TlSbSe_2$ товщиною 2500 Å. Автори роботи показали, що отримана плівка сполуки $TlSbSe_2$ характеризується ромбічною кристалічною ґраткою з параметрами $a = 4{,}18$ Å, $b = 4{,}50$ Å, $c = 12{,}0$ Å [1]. Дослідження кристалічної структури сполуки $TlSbSe_2$ на об'ємних зразках проводилось у роботах [1–3]. Відомо, що сполука $TlSbSe_2$ може перебувати у кількох кристалічних структурах. Автори Вакер та ін. повідомляють про фазу кристала, що існує за кімнатної (rt-фаза) [2]. У цій фазі кристали належать до моноклинної системи з просторовою групою симетрії $P2_1$ (C_2^2). Для неї отримано такі параметри кристалічної ґратки: a = 9,137 Å, b = 4,097 Å, c = 12,765 Å, β = 111,75°. За високої температури спостерігається високотемпературна фаза (ht-фаза). Також, між високотемпературною та фазою за кімнатної температури повідомляють про існування ще однієї додаткової фази, що є частково впорядкованою [4]. Дослідженню цих фаз не приділено значної уваги науковців.

У роботі [3] авторами проводились дослідження оптичних фононів за допомогою вимірювання спектрів відбивання у частотних діапазонах 50-250 cm^{-1} та 200-4000 cm^{-1}. Електричні, термоелектричні, оптичні властивостей кристалів $TlSbSe_2$ вивчались у працях [3,5–7].

Авторами [8] проводились дослідження електронної структури кристала $TlSbSe_2$ в фазі з кубічною симетрією, тоді як для моноклінної фази, що існує за кімнатної фази подібні дослідження нам не відомі. З огляду на це, актуальним є дослідження електронної структури та властивостей кристала $TlSbSe_2$ в моноклінній кристалічній фазі за кімнатної температури.

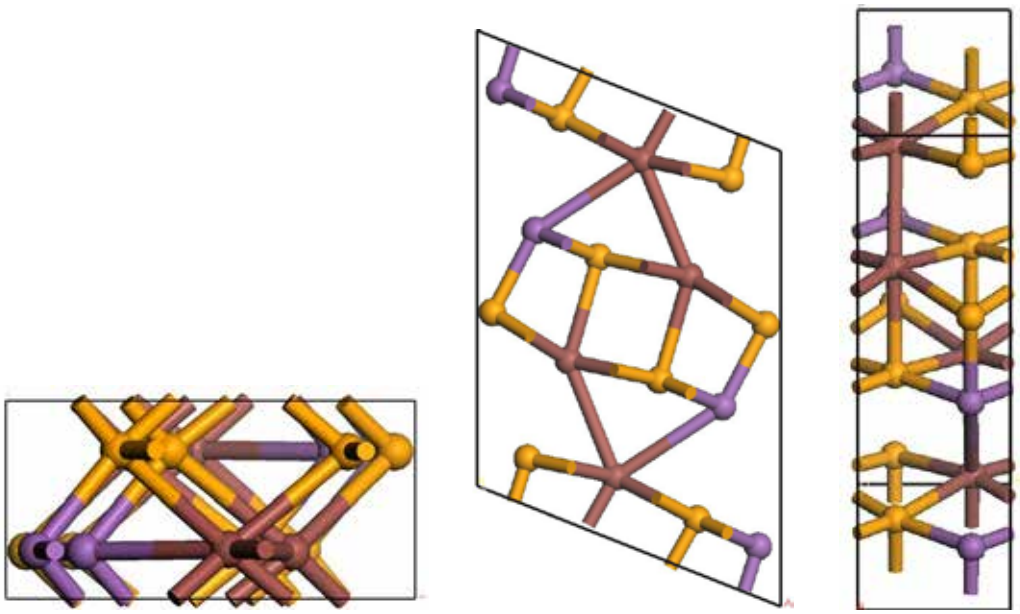
У цій роботі проведено першопринципні розрахунки оптико-електронних властивостей кристала $TlSbSe_2$ у кристалічній структурі з симетрією $P2_1$. Розрахунки проводяться самоузгоджено в рамках теорії функціоналу густини (DFT). На основі теоретичних розрахунків з'ясовано особливості будови електронних рівнів кристала, та їхнє походження.

Робота складається з трьох розділів. У розділі 2 зібрано деталі проведених розрахунків та використані параметри. Третій розділ містить основні результати, отримані в роботі, та їхнє обговорення. Наприкінці статті подано головні висновки, подяки та список цитованої літератури.

Методика розрахунків. Першопринципні розрахунки проводились з використанням програми CAmbridge Serial Total Energy Package (CASTEP) [9]. Програма є реалізацією теорії функціоналу густини (DFT) [8], яка базується на теоремах Хоенберга-Кона [10]. Енергії електронних станів та хвильові функції електронів отримували як власні значення та власні функції системи рівнянь Кона-Шема. Електрони аомів описувались у вигляді плоских хвиль Блохівського типу. Для опису валентних електронів досліджуваної системи використано наступну електронну конфігурацію: Se $4s^2\ 4p^4$; Sb $5s^2\ 5p^3$; Tl $5d^{10}\ 6s^2\ 6p^1$. Енергія відсікання плоских хвиль E_{cut} становила 450 еВ. Врахування квантових ефектів обміну та кореляції здійснено в рамках наближення узагальненого градієнтного наближення (GGA) [11] з параметризацією Пердю-Бурке-Ернзергофа (PBE) [11,12]. Ядро атомів разом з остовними електронами описувався за допомогою псевдопотенціалів. В роботі використано ультрамякий псевдопотенціал Вандербільта [13], що потребують меншої кількості плоских хвиль. Під час розрахунків простір розбивався а k-сітку, по якій відбувалось інтегрування. Побудова зонно-енергетичної структури та інтегрування проводилось по k-сітці першої зони Бріллюена розміром 3×5×2. Геометрична оптимізація проводилась з використанням BFGS алгоритму [14], для якої застосовувано такі параметри збіжності: енергія – $5 \cdot 10^{-6}$ еВ/атом; максимальна сила – 10^{-2} еВ/Å; максимальний тиск – $2 \cdot 10^{-2}$ ГПа; максимальне зміщення – $5 \cdot 10^{-4}$ Å.

Результати і обговорення

Структура кристалічної ґратки. Для розрахунків властивостей кристала $TbSbSe_2$ у якості вхідних параметрів використовувалась інформація про кристалічну структуру, взята з роботи [2]. Ці кристали належать до моноклінної симетрії з просторовою групою симетрії $P2_1$. У ґратці кристала $TbSbSe_2$ міститься 16 атомів. Вигляд кристалічної ґратки зображено на рисунку 1. Як видно з рисунка,



а) б) в)

Рис. 1. Структура кристалічної гратки кристала $TlSbSe_2$:
а) площина *xy*; б) площина *xz*; в) площина *yz*

Примітка: атоми зображені кульками з таким кольорами:Tl – коричневий; Sb – фіолетовий; Se – жовтий

Таблиця 1

Експериментальні [2, 5] та оптимізовані з використанням GGA-функціонала кристалографічні параметри кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі

Параметр	Exp. [2]	Exp. [5]	GGA
a, Å	9,137	9,130	9,197
b, Å	4,097	4,100	4,146
c, Å	12,765	12,750	13,379
V, Å^3	443,830	477,270	472,229
α, °	90	90	90
β, °	111,75	111,63	112,25
γ, °	90	90	90

кристалічна структура характеризується шаруватістю, з шарами, що знаходяться в площині *xz*.

Параметри кристалічної ґратки та координати атомів взяті з роботи [2] зібрано у табл. 1 та 2. Перед розрахунком властивостей досліджуваного кристала проводилась процедура геометричної оптимізації [15,16]. Вона приводить до отримання релаксованої структури якій відповідає рівноважний стан системи. У роботі, враховуючи симетрію, оптимізовувались як параметри ґратки, так і координати атомів. Теоретичні кристалографічні параметри зібрано у табл. 1 та 2. Оптимізовані Теоретичні параметри ґратки характеризуються незначним завищенням порівняно з експериментальними даними робіт [2,5], що відповідає відомій особливості GGA функціоналу. Як видно з таблиці, найкраще узгодження теоретично розрахованого параметра ґратки відповідає параметру *a* (відхилення δa = 0,6%). Найбільше відхилення спостерігається для параметра *c* (δc = 4,8%), тоді як для параметра *b* завищення також є незначним і становить δb = 1,2%. Водночас, варто зазначити, що оптимізована структура володіє на 30' більшим кутом β за експериментальний. Об’єм теоретичної ґратки отриманої після оптимізації є на 6,4 % більшим за експериментальний, що також вказує на узгодження теорії та експерименту.

Таблиця 2

Експериментальні [2] та оптимізовані з використанням GGA-функціонала відносні координати атомів у комірці кристала $TlSbSe_2$

Атом	Експ. [2]			GGA		
	x/a	*y/b*	*z/c*	*x/a*	*y/b*	*z/c*
Tl1	0.699261	0.222587	0.638385	0.698700	0.237700	0.644900
Tl2	0.540578	0.255044	0.862328	0.544700	0.250000	0.859500
Tl3	–0.699261	0.722587	–0.638385	–0.698700	0.737700	–0.644900
Tl4	–0.540578	0.755044	–0.862328	–0.544700	0.750000	–0.859500
Sb1	0.187972	0.226143	0.604651	0.192300	0.241000	0.611300
Sb2	0.071279	0.270134	0.891370	0.075300	0.246000	0.887500
Sb3	–0.187972	0.726143	–0.604651	–0.192300	0.741000	–0.611300
Sb4	–0.071279	0.770134	–0.891370	–0.075300	0.746000	–0.887500
Se1	0.731818	0.262042	0.114027	0.723700	0.249000	0.118400
Se2	0.049568	0.231983	0.394489	0.050700	0.241000	0.394900
Se3	0.608543	0.228691	0.392763	0.600600	0.245000	0.392100
Se4	0.167770	0.255075	0.101099	0.165400	0.242000	0.104100
Se5	–0.731818	0.762042	–0.114027	–0.723700	0.749000	–0.118400
Se6	–0.049568	0.731983	–0.394489	–0.050700	0.741000	–0.394900
Se7	–0.608543	0.728691	–0.392763	–0.600600	0.745000	–0.392100
Se8	–0.167770	0.755075	–0.101099	–0.165400	0.742000	–0.104100

Електронна структура кристала $TlSbSe_2$. Зонно-енергетична структура кристала $TlSbSe_2$ розраховувалась з використанням GGA функціоналу в точках високої симетрії та вздовж ліній, що їх з'єднують за такими напрямками: Z → Г → Y → A → B → D → E → C. Структура першої зони Бріллюена для досліджуваного кристала зображена на рисунку 1. Координати точок високої симетрії у першій зоні Бріллюена наведені в підписі до рисунка.

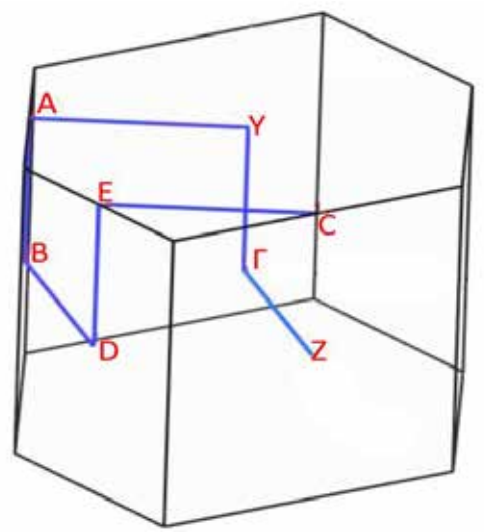
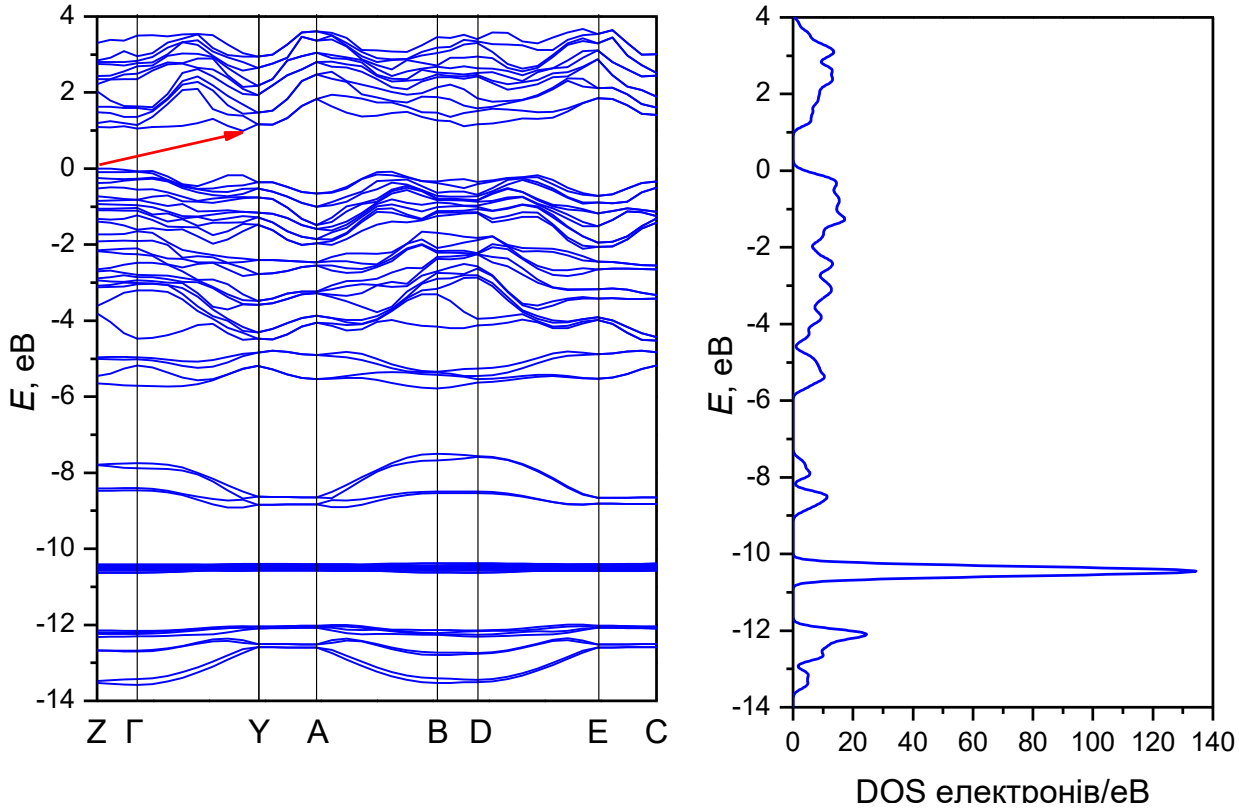


Рис. 2. Структура першої зони Бріллюена для кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі

Примітка: координати точок високої симетрії такі: Z(0 0 1/2); Г(0 0 0); Y(0 1/2 0); A(-1/2 1/2 0); B(-1/2 0 0); D(-1/2 0 1/2); E(-1/2 1/2 1/2); C(0 1/2 1/2).

Розрахована зонно-енергетична структура кристала $TlSbSe_2$ представлена на рисунку 3 а. Енергетична відмітка 0 еВ відповідає вершині валентної зони та є суміщена з рівнем Фермі. Зона провідності утворена широкою смугою, що складається з низки близько розташованих електронних рівнів, які частково перекриваються між собою. Рівні зони провідності характеризуються помірною дисперсією. Дно зони провідності знаходиться на сегменті Г → Y зони Бріллюена.

Вершина валентної зони формується широкою смугою, що знаходиться на проміжку від 0 до – 5,8 еВ. Рівні, що формують вершину валентної зони характеризуються дисперсією, подібною до дисперсії рівнів зони провідності. У напрямках Z → Г, Y → A та E → C електронні рівні вироджені, тоді як для інших напрямків спостерігається їхнє розщеплення. Така характеристика притаманна як для рівнів валентної зони, так і для рівнів зони провідності. За нижчих енергій спостерігаються три групи рівнів, які чітко відокремлені на повній густині станів (DOS) (рис. 3 б). За енергії близько –8 еВ смуга утворена двома близько розташованими рівнями, які розщеплюються в чотири. Смуга поблизу –10,5 еВ відповідає групі рівнів, що володіють найменшою дисперсією, та є сильно



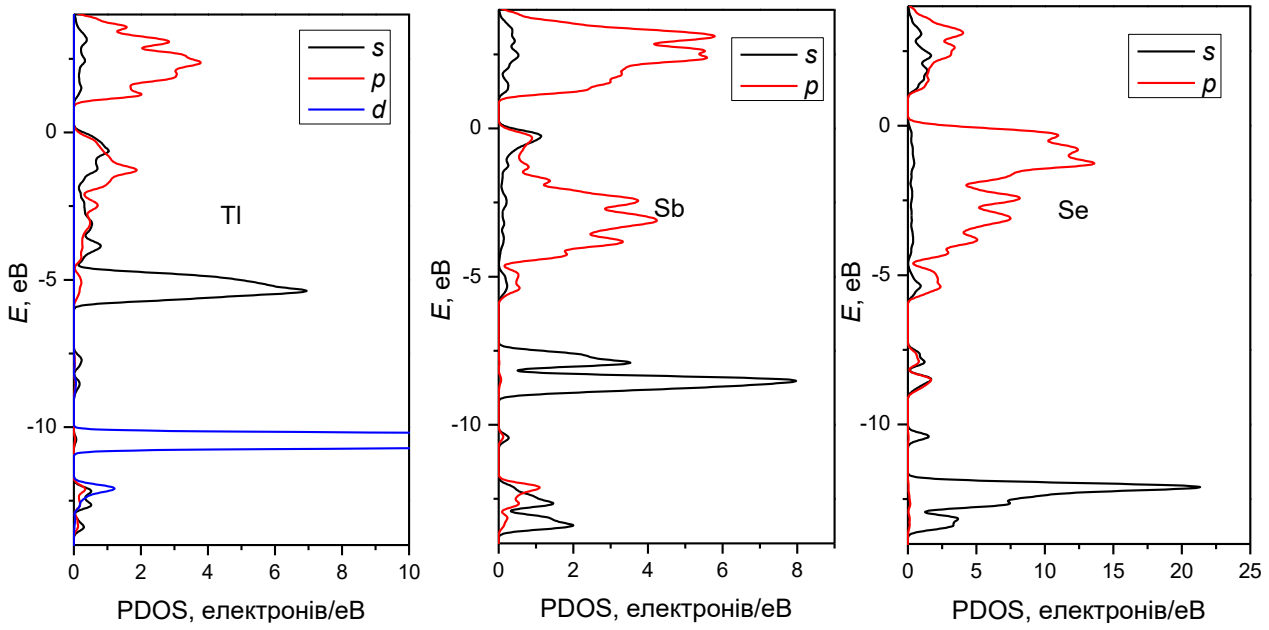
а) б)

Рис. 3. Зонно-енергетична структура кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі розрахована з використанням GGA-функціонала

локалізованими. У спектрі DOS цій смузі відповідає найінтенсивніша вузька смуга. За енергій від –12 до –13,5 еВ також знаходиться група близько розташованих підрівнів. Вершина валентної зони знаходиться в точці Z першої зони Бріллюена. Підсумовуючи вище сказане, заборонена зона кристала $TlSbSe_2$ є не прямого типу. Розрахована з використанням GGA функціоналу ширина забороненої зони становить E_g = 0,99 еВ. Як і для дослідженої раніше сполуки Ag_3SbS_3 [17], очікується заниження значення ширини забороненої зони, що притаманне для методі теорії функціоналу густини з використанням градієнтного наближення для опису обмінно-кореляційної взаємодії.

На рисунку 4 зображено розраховану парціальну густину електронних станів кристала $TlSbSe_2$ для внесків окремих атомів. Зона провідності досліджуваного кристала утворена сукупністю *s*- та *p*-станів атомів Tl, Sb та Se. Вершина валентної зони утворена *s*-станами атомів Sb та *p*-станами атомів Se. Широка смуга у спектрі DOS, що формує вершину валентної зони формується смугою *p*-електронів атомів Se, що дає основний внесок на проміжку від 0 до –2 еВ, та *p*-станами Sb для якого основний максимум припадає на проміжок від –2 до –4,6 еВ. Смуга поблизу –5 еВ утворена *s*-станами талію. *s*-електрони Sb формують дві вузькі близько розташовані смуги за енергій –7,8 та –8,5 еВ. За енергії –10,4 еВ знаходиться сильно локалізована смуга великої інтенсивності, що відповідає *d*-станам атомів Tl. Припускаємо, що для досліджуваного кристала може спостерігатись незначний зсув *d*-станів Tl пов'язаний сильною локалізацією *d*-електронів. За енергії –12 еВ спостерігається смуга *s*-станів атомів Se.

Висновки. В рамках теорії функціоналу густини проведено першопринципне дослідження електронної структури кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі. Проведено геометричну оптимізацію кристалічної структури та з'ясовано, що найкраще узгодження з експериментальними результатами дає параметр ґратки *a* (відхилення δa = 0,6%), а найбільше відхилення отримано для параметра *c*, для якого відхилення становить 4,8%. Для оптимізованої ґратки зареєстровано збільшення кута β на 30'.



а) б) в)

Рис. 4. Парціальна густина станів кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі розрахована з використанням GGA-функціонала

Як наслідок незначного завищення параметрів ґратки, об'єм теоретичної комірки кристала зростає на 6,4 % від експериментального значення отриманого в роботі [2]. Вперше розрахована зонно-енергетична структура кристала $TlSbSe_2$ у моноклінній фазі та проведено її обговорення. Виявлено, що зона провідності та вершина валентної зони кристала утворені широкими смугами, що складається з близько розташованих електронних рівнів. Дно зони провідності знаходиться на сегменті Γ → Y зони Бріллюена, а рівні, що формують вершину валентної зони характеризуються дисперсією, подібною до дисперсії рівнів зони провідності. Вершина валентної зони знаходиться в точці Z першої зони Бріллюена утворюючи з найнижчим рівнем зони провідності заборонену зону не прямого типу. Ширина забороненої зони становить E_g = 0,99 еВ. За допомогою парціальної густини станів встановлено, що зона провідності утворена *s*- та *p*-станів атомів Tl, Sb та Se. Вершина валентної зони формується *s*-станами сурми та *p*-станами селену. Широка смуга у спектрі DOS, що формує вершину валентної зони формується смугою *p*-електронів атомів Se, яка дає основний внесок на проміжку від 0 до –2 еВ, та *p*-станами Sb для якого основний максимум припадає на проміжок від –2 до –4,6 еВ. Найінтенсивніший пік у спектрах DOS/PDOS відповідає локалізованим *d*-станам атомів Tl.

Подяки. Результати, представлені у цій роботі, отримані за підтримки проєкту молодих вчених 0123U100599 Міністерства освіти і науки України. Частина результатів отримана в рамках проєкту Національного центру науки Польщі, грант № NCN 2018/31/B/ST4/00924. (This work was partially supported by the National Science Centre (NCN), Poland, grant number: NCN 2018/31/B/ST4/00924.).

ЛІТЕРАТУРА:

1. Deger D., Ulutas K., Yildirim S., Kalkan N. Relaxation spectrum of the $TlSbSe_2$ thin films, *Physica B: Condensed Matter.* 2009. 404. P. 5231–5233.
2. Wacker K., Salk M., Decker-Schultheiss G., Keller E. Die Kristallstruktur der geordneten Phase der Verbindung $TlSbSe_2$, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie.* 1991. 606. P. 51–58.
3. Syrbu N. N., Krasovsky V. T., Grincheshen I. N. Optical Phonons and Chemical Bonding in $TlSbS_2$, $TlSbSe_2$, and Tl_3SbS_3 Crystals, *Crystal Research and Technology.* 1993. 28. P. 371–380.
4. Gervais F. Infrared and Millimeter Waves, 8th ed., Academic Press, New York, P. 1983.

5. Chrissafis K., Ozer M., Vinga E., Polychroniadis E., Chatzistavrou X., Paraskevopoulos K. M. Characterization and phase transformation study of $TlSbSe_2$ crystals, *J Therm Anal Calorim*. 2006. 86. P. 839–843.

6. Ren J., Whangbo M. H., Bengel H., Cantow H. J., Magonov S. N. Interpretation of the scanning tunneling and atomic force microscopy images of layered compound $TlSbSe_2$ by electron density calculations, *Chemistry of Materials*. 1993. 5. P. 1018–1023.

7. Banys J., Grigas J., Valiukenas V., Wacker K. Microwave dielectric properties of $TlSbSe_2$ crystals, *Solid State Communications*. 1992. 82. P. 633–636.

8. Hoang K., Mahanti S. Atomic and electronic structures of thallium-based III-V-VI_2 ternary chalcogenides: Ab initio calculations, *Physical Review B*. 2008. 77. P. 205107.

9. Clark S. J., Segall M. D., Pickard C. J., Hasnip P. J., Probert M. I. J., Refson K., Payne M. C. First principles methods using CASTEP, *Zeitschrift Für Kristallographie – Crystalline Materials*. 2005. 220. P. 567–570.

10. Lee J. G. Computational Materials Science: An Introduction.*CRC Press*. 2013. P. 269.

11. Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 1981. 23. P. 5048–5079.

12. Perdew J. P., Burke K. Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett*. 1996. 77. P. 3865–3868.

13. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism, *Phys. Rev. B*. 1990. 41. P. 7892–7895.

14. Pfrommer B. G., Côté M., Louie S. G., Cohen M. L. Relaxation of Crystals with the Quasi-Newton Method, *Journal of Computational Physics.* 1997. 131. P. 233–240.

15. Chrunik M., Majchrowski A., Ozga K., Rudysh M. Ya., Kityk I. V., Fedorchuk A. O., Stadnyk V. Yo., Piasecki M. Significant photoinduced increment of reflectivity coefficient in $LiNa_5Mo_9O_{30}$, *Current Applied Physics.* 2017. 17. P. 1100–1107.

16. Chen J. – A., Piasecki M., Yang C. – C., Rudysh M., Liu W. – R. Synthesis, luminescent properties and ab initio study of yellow-emitting $Sr_8MgGa(PO_4)_7$:Eu^{2+}phosphors for white light-emitting diodes, *Journal of Luminescence*. 2021. 235. P. 117982.

17. Rudysh M. Y., Myronchuk G. L., Fedorchuk A. O., Marchuk O. V., Kordan V. M., Kohan O. P., Myronchuk D. B., Smitiukh O. V. Electronic structure and optical properties of the Ag3SbS3 crystal: experimental and DFT studies, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2023. 25. P. 22900–22912.

REFERENCES:

1. Deger, D., Ulutas, K., Yildirim, S., & Kalkan, N. (2009). Relaxation spectrum of the $TlSbSe_2$ thin films, *Physica B: Condensed Matter.* 404. P. 5231–5233.

2. Wacker, K., Salk, M., Decker-Schultheiss, G., & Keller, E. (1991). Die Kristallstruktur der geordneten Phase der Verbindung $TlSbSe_2$, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie.* 606. P. 51–58.

3. Syrbu, N.N., Krasovsky, V.T., Grincheshen, I.N. (1993). Optical Phonons and Chemical Bonding in $TlSbS_2$, $TlSbSe_2$, and Tl_3SbS_3 Crystals, *Crystal Research and Technology.* 28. P. 371–380.

4. Gervais, F. Infrared and Millimeter Waves, 8th ed., Academic Press, New York, P. 1983.

5. Chrissafis, K., Ozer, M., Vinga, E., Polychroniadis, E., Chatzistavrou, X., & Paraskevopoulos, K.M. (2006). Characterization and phase transformation study of $TlSbSe_2$ crystals, *J Therm Anal Calorim*. 86. P. 839–843.

6. Ren, J., Whangbo, M.H., Bengel, H., Cantow, H.J., & Magonov, S.N. (1993). Interpretation of the scanning tunneling and atomic force microscopy images of layered compound $TlSbSe_2$ by electron density calculations, *Chemistry of Materials*. 5. P. 1018–1023.

7. Banys, J., Grigas, J., Valiukenas, V., & Wacker, K. (1992). Microwave dielectric properties of $TlSbSe_2$ crystals, *Solid State Communications*. 82. P. 633–636.

8. Hoang, K., & Mahanti, S. (2008). Atomic and electronic structures of thallium-based III-V-VI_2 ternary chalcogenides: Ab initio calculations, *Physical Review B*. 77. P. 205107.

9. Clark, S.J., Segall, M.D., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Probert, M.I.J., Refson, K., & Payne, M.C. (2005). First principles methods using CASTEP, *Zeitschrift Für Kristallographie – Crystalline Materials*. 220. P. 567–570.

10. Lee, J.G. (2013). Computational Materials Science: An Introduction.*CRC Press*. P. 269.

11. Perdew, J.P., & Zunger, A. (1981). Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 23. P. 5048–5079.

12. Perdew, J.P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett*. 77. P. 3865–3868.

13. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism, *Phys. Rev. B*. 41. P. 7892–7895.

14. Pfrommer, B.G., Côté, M., Louie, S.G., & Cohen, M.L. (1997). Relaxation of Crystals with the Quasi-Newton Method, *Journal of Computational Physics.* 131. P. 233–240.

15. Chrunik, M., Majchrowski, A., Ozga, K., Rudysh, M.Ya., Kityk, I.V., Fedorchuk, A.O., Stadnyk, V.Yo., & Piasecki, M. (2017). Significant photoinduced increment of reflectivity coefficient in $LiNa_5Mo_9O_{30}$, *Current Applied Physics.* 17. P. 1100–1107.

16. Chen, J.-A., Piasecki, M., Yang, C.-C., Rudysh, M., & Liu, W.-R. (2021). Synthesis, luminescent properties and ab initio study of yellow-emitting $Sr_8MgGa(PO_4)_7$:Eu^{2+}phosphors for white light-emitting diodes, *Journal of Luminescence*. 235. P. 117982.

17. Rudysh, M.Y., Myronchuk, G.L., Fedorchuk, A.O., Marchuk, O.V., Kordan, V.M., Kohan, O.P., Myronchuk, D.B., & Smitiukh, O.V. (2023). Electronic structure and optical properties of the Ag3SbS3 crystal: experimental and DFT studies, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25. P. 22900–22912.

УДК 372.51
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-7

Микола САДОВИЙ
доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри математики та цифрових технологій, Центральноукраїнський державний університет імені Володимира Винниченка, вул. Шевченко, 1, м. Кропивницький, Україна, 25006
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0001-6582-6506*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57217117696*

Олена ТРИФОНОВА
доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри математики та цифрових технологій, Центральноукраїнський державний університет імені Володимира Винниченка, вул. Шевченко, 1, м. Кропивницький, Україна, 25006
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-6146-9844*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57217117658*

Бібліографічний опис статті: Садовий, М., Трифонова, О. (2024). Особливості методики формування віртуальних дослідів із вивчення розподілу молекул за швидкостями. *Фізика та освітні технології*, 1, 57–62, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-7

ОСОБЛИВОСТІ МЕТОДИКИ ФОРМУВАННЯ ВІРТУАЛЬНИХ ДОСЛІДІВ ІЗ НАВЧАННЯ РОЗПОДІЛУ МОЛЕКУЛ ЗА ШВИДКОСТЯМИ

Стаття присвячена мало досліджений в методиці навчання проблемі – навчання газових явищ. Розкрито один із варіантів методики та її особливостей у формуванні віртуальних дослідів із навчання розподілу молекул за швидкостями. Акцент не робиться на можливості постановки експериментального завдання з підтвердження висновків Дж. Максвелла, та яка роль при цьому відводиться фізичним величинам: маса частинок, температура газу, швидкостям та ін. Не розглядаються можливі методи дослідження, зокрема віртуальні в середовищі просторового розподілу різношвидкісних частинок.

Виокремлено, що при виводі рівняння ідеального газу розглядається постійна, однакова за величиною швидкість всіх молекул і відповідно не розглядається настільки відхиляються одержані результати у формулах від тих, що розглядає Дж. Максвелл, Р. Клаузіс. Пропонується цю плутаницю розв'язати. Запропоновано один з віртуальних експериментальних методів просторового поділу частинок за швидкостями заснований на впливі сили тяжіння на дальність польоту молекул, що вилетіли, наприклад, із посудини. Реалізація ідеї віртуального експерименту ґрунтується на відомих теоретичних та практичних висновках: маємо ідеальний газ; відомі експериментальні результати значень середньоарифметичної, середньоквадратичної та ймовірнісної швидкостей; реальним є створення постійної концентрації газу в посудині; рух молекул у посудині є рівноймовірним. Аналіз одержаних у віртуальному досліді даних показує досить виокремлені три частини: ліворуч осідають молекул із середньоарифметичною швидкістю, в середній частині – найбільш ймовірнісною і праворуч – середньоквадратичною швидкістю, що якісно підтверджує математичну модель розподілу молекул Максвелла.

У подальшому дослідження доцільно проводити в напрямку модернізації такого виду дослідів та з'ясування фізичної суті понять імпульсу, тиску кінетичної енергії молекул газу.

Ключові слова: *фундаментальні досліди, віртуальний, розподіл молекул, частинки, швидкість.*

Mykola SADOVYI
Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Professor of the Department of Mathematics and Digital Technologies of Volodymyr Vynnychenko Central Ukrainian State University, 1 Shevchenko Str., Kropyvnytskyi, Ukraine, 25006
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0001-6582-6506*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57217117696*

Olena TRYFONOVA
Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Head of the Department of Mathematics and Digital Technologies of Volodymyr Vynnychenko Central Ukrainian State University, 1 Shevchenko Str., Kropyvnytskyi, Ukraine, 25006
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0002-6146-9844*
SCOPUS-AUTHOR ID: *57217117658*

To cite this article: Sadovyi, M., Tryfonova, O. (2024). Osoblyvosti metodyky formuvannya virtual′nykh doslidiv iz navchannya rozpodilu molekul za shvydkostyamy [Peculiarities of the method of forming virtual experiments on learning the distribution of molecules by velocities]. *Physics and Educational Technology*, 1, 57–62, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-7

PECULIARITIES OF THE METHOD OF FORMING VIRTUAL EXPERIMENTS ON LEARNING THE DISTRIBUTION OF MOLECULES BY VELOCITIES

The article is devoted to a little researched method of teaching gas phenomena. One of the variants of the technique and its features in the formation of virtual experiments on the study of the distribution of molecules by velocities is revealed. The emphasis is not placed on the possibility of setting up an experimental task to confirm J. Maxwell's conclusions, and what role is given to physical quantities: mass of particles, gas temperature, velocities, etc. Possible research methods, in particular virtual ones in the environment of spatial distribution of particles with different speeds, are not considered.

It is highlighted that when deriving the equation of an ideal gas, a constant, equal velocity of all molecules is considered and, accordingly, the obtained results in the formulas are not considered so different from those considered by J. Maxwell, R. Clausis. It is proposed to resolve this confusion. One of the virtual experimental methods of spatial separation of particles based on velocities is proposed, based on the influence of gravity on the flight range of molecules that have flown out, for example, from a vessel. The implementation of the idea of a virtual experiment is based on known theoretical and practical conclusions: we have an ideal gas; known experimental results of arithmetic mean, root mean square and probabilistic velocities; the creation of a constant gas concentration in the vessel is real; the movement of molecules in the vessel is equally probable. The analysis of the data obtained in the virtual experiment shows three rather distinct parts: on the left, molecules settle with the average arithmetic speed, in the middle part – the most probable, and on the right – with the mean square speed, which qualitatively confirms Maxwell's mathematical model of the distribution of molecules.

In the future, it is advisable to carry out research in the direction of modernization of this type of experiments and clarification of the physical essence of the concepts of momentum, pressure, kinetic energy of gas molecules.

Key words: *fundamental experiments, virtual, distribution of molecules, particles, speed.*

Актуальність проблеми. Методика навчання розподілу молекул ідеального газу за швидкостями передбачає ознайомлення суб'єктів навчання з теоретичними висновками Дж. Максвелла та дослідом О. Штерна. Проте акцент не робиться на можливості постановки експериментального завдання з підтвердження висновків Дж. Максвелла, та яка роль при цьому відводиться фізичним величинам: маса частинок, температура газу, швидкостям та ін. Не розглядаються можливі методи дослідження, зокрема, віртуальні в середовищі просторового розподілу різношвидкісних частинок.

У навчальній і методичній літературі знайомство студентів і школярів із подібними фундаментальними дослідами проводиться в описовому вигляді. Це пояснюється, насамперед, відсутністю обладнання та приладів для постановки таких дослідів. Заклади освіти не мають необхідного технічного і фінансового потенціалу для їх проведення навіть в демонстраційному варіанті. Такого характеру досліди повинні мати високу доказовість, так як вони є наочними через неможливість спостерігати рух частинок із різними швидкостями в приладі. У таких випадках використовується метод аналогій або віртуальні досліди. Зокрема, в методичній літературі описується механічна модель, що дозволяє візуалізувати розподіл Максвелла.

Виникає суперечність, яку в методичній і спеціальній літературі не аналізують. Традиційно величина швидкості розглядається лише як функція траєкторії. Крім цього, здійснюється не зовсім коректний перехід до введення поняття квадрату середнього значення швидкості, а потім і середньоквадратичної швидкості запозичивши її у Л. Больцмана. На окремі аспекти проблеми вказували лише окремі вчені. Є неоднозначність із розподілом газових молекулярних швидкостей та їх траєкторій, а відповідно – імпульсу, тиску, енергії та ін.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Щоб бути більш близьким до реалізації висловленої ідеї доцільно простежити шлях становлення висновків учених щодо розподілу молекул за швидкостями. У 1738 р. Даніель Бернуллі опублікував модель, яка містить основні рамки сучасної кінетичної молекулярної теорії. Рудольф Клаузіус продовжив дослідження моделі й у 1857 р. запровадив концепцію середнього вільного шляху пробігу частинок. Ці ідеї були надалі розвинені Максвеллом у 1873 р. у його розподілі молекул за швидкостями. Після теоретичного обґрунтування Дж. Максвелом математичної моделі розподілу молекул за швидкостями його теоретичні результати підтвердив Л. Больцман.

Дослідник О. Штерн (1920) експериментально підтвердив математичну модель Максвелла. В наступному більш досконалі досліди з підтвердження цієї моделі провели Е. Елдрідж (1927), Б. Ламмерт (1926–1929), І. Естерман (1947), Д. Міллер та П. Куш (1955) та ін., де використовувалося зміщення молекулярного пучка у полі тяжіння.

Методичні особливості навчання розподілу молекул за швидкостями в курсі теоретичної фізики вивчав О. Школа (Школа, 2013). О. Харитонова, Г. Борисова розглянули методику навчання розподілу Максвелла у закладах фахової передвищої освіти (Харитонова, 2016). Обґрунтування математичного моделювання поняття розподілу молекул за швидкостями розглянуто Th. Krobthong, F. Rivadulla, Ftáčnik J., Lichard P., Přsút J. (Krobthong, 2015; Ftáčnik, 1983).

Мета дослідження. При виводі рівняння ідеального газу розглядається постійна, однакова за величиною швидкість усіх молекул і відповідно не розглядається настільки відхиляються одержані результати у формулах від тих, що розглядає Дж. Максвелл, Р. Клаузіс. Виникає суперечність, яку в методичній і спеціальній літературі не аналізують. Традиційно величина швидкості розглядається лише як функція траєкторії. Крім цього, здійснюється не зовсім коректний перехід до введення поняття квадрату середнього значення швидкості, а потім і середньоквадратичної швидкості запозичивши її у Л. Больцмана. На деякі аспекти проблеми вказували лише окремі вчені. Є неоднозначність із розподілом газових молекулярних швидкостей та їх траєкторій, а відповідно імпульсу, тиску, енергії та ін. Ми вважаємо, що цю плутаницю необхідно розв'язати, що й склало **мету статті**.

Виклад основного матеріалу дослідження. У більшості навчальної літератури розподіл Максвела за швидкостями аналізується за рівноважного стану газу. Це означає, що число молекул, швидкість яких при зіткненні збільшується, дорівнює числу молекул, швидкість яких при зіткненні зменшується. Тобто, якщо газ виведено з рівноважного стану, то розподіл молекул за швидкостями буде відрізнятися від розподілу Максвелла. Однак молекули хаотично рухаються і постійно зіштовхуються. Через невеликий час газ згідно з принципом самоорганізації сам собою переходить у стан рівноваги. Такий процес буде неперервним. Виходячи з таких міркувань можна дати визначення поняття хаотичності теплового руху: рух молекул газу хаотичний, якщо молекули розподіляються за швидкостями у відповідності з законом Максвелла.

Доцільно здійснювати аналіз складових швидкостей у розподілі. Загальновідома функція математичного розподілу молекул за швидкостями Максвелла складається з трьох складових: константи нормалізації $\sqrt{\frac{m}{2\pi kT}}$ (виводиться з умови нормування $\int_{-\infty}^{\infty} f(\upsilon_x)\,d\upsilon_x = 1$), швидкості ($\upsilon^2$), експотенціального виразу, куди входить вираз кінетичної енергії.

Р. Флемінг, який займається молекулярним моделюванням для аналізу швидкостей молекул виділяє поняття об'єм зіткнень $V=l_x\,\Delta S$, де l_x – пройдений шлях групи молекул, ΔS – площа, на яку потрапляють молекули, Δt – час проходження молекулою визначеного шляху із швидкістю υ_x. Тоді $V=\upsilon_x\,\Delta t\,\Delta S$, а кількість частинок, що зіткнуться з площею перепони складає $N=\frac{1}{2}N_V\frac{V}{V_{заг}}=\frac{1}{2}N_V\frac{\upsilon_x\Delta t\Delta S}{V_{заг}}$ (Krobthong, 2015).

Один із віртуальних експериментальних методів просторового поділу частинок за швидкостями заснований на впливі сили тяжіння на дальність польоту молекул, що вилетіли, наприклад, з посудини. Рух частинок у полі сили тяжіння є рівноприскореним. У загальному випадку дальність польоту x частинки, що влетіла в досліджуване поле сили тяжіння під кутом φ до горизонту на висоті h, залежить від її початкової швидкості υ. Математично такий рух описується рівняннями $gx^2 - \upsilon^2 \sin 2\varphi$;

$x = 2h\upsilon^2\cos^2\varphi$. З цих рівнянь випливає, що чим більша початкова швидкість υ руху частинки в полі сили тяжіння, тим більша її дальність польоту x. За дальністю польоту частинок, що вилетіли з виокремленої посудини під певним кутом до горизонту, можна розрахувати їхні швидкості в посудині: $\upsilon = \sqrt{\dfrac{gx^2}{h + h\cos 2\alpha + x\sin 2\alpha}}$. Щоб частинка, що вилетіла з посудини, потрапила на горизонтальну ділянку $[x_{i-1}, x_i]$ потрібно, щоб у посудині ця частика мала швидкість в околі $[\upsilon_{i-1}, \upsilon_i]$. Враховуємо, що розподіл молекул за швидкостями у посудині має відповідати розподілу Максвелла.

Реалізація методу просторового розподілу частинок, що мають різні швидкості, за рахунок впливу сили тяжіння на дальність польоту пов'язана з низкою технічних труднощів. Молекули реальних газів мають велику середньоквадратичну швидкість ($\upsilon_{кв} \sim 10^2$–10^3 м/с при кімнатній температурі). При цьому їхня дальність польоту в полі сили тяжіння могла б скласти ~10^4–10^5 м (у вакуумі). Реалізація цих умов ні в науковій, ні в навчальній лабораторії неможлива. Тому доцільно скористатися віртуальною комп'ютерною моделлю досліду з демонстрації розподілу Максвелла.

Розташування отвору на поверхні судини (рис. 1) дозволяє розглянути ще одну особливість запропонованого комп'ютерного методу. Розглянемо випадок, коли частинки вилітають з посудини горизонтально ($\alpha = 0$). Дальність польоту лінійно залежить від швидкості υ. В інших випадках ($\alpha > 0$) дальність польоту залежить від модуля швидкості нелінійно. Тобто осередку, розташованого далеко від посудини, буде відповідати більший діапазон швидкостей, ніж осередку тієї ж довжини поблизу судини. Ця особливість методу не перешкоджає отриманню інформації про статистичний розподіл і не перешкоджає отриманню інформації про статистичний розподіл часток «газу» за швидкостями. На це необхідно звернути увагу, щоб сформувати повне уявлення про використання обраного методу. Дана комп'ютерна лабораторна робота надає для цього необхідні дидактичні можливості.

Для підтримки постійного розподілу часток «газу» за швидкостями в посудині обрана модель повністю не взаємодіючих одна з одною матеріальних точок (зіткнення між частинками відсутнє), що дозволяє уникнути перерозподілу кінетичної енергії між частинками в посудині після того, як частина частинок покинула посудину. В умовах комп'ютерної реалізації ідеальної теоретичної моделі цього легко досягти.

Реалізація ідеї віртуального експерименту ґрунтується на відомих теоретичних та практичних висновках: маємо ідеальний газ; відомі експериментальні результати значень середньоарифметичної, середньо-квадратичної та ймовірнісної швидкостей; реальним є створення постійної концентрації газу в посудині; рух молекул у посудині є рівноймовірним.

Головною частиною фізичної частини моделі комп'ютерної експериментальної установки є посудина з газом, наприклад, водяною парою, вуглекислим газом, азотом тощо. Кожна група рухомих молекул створює тиск на стінки посудини. Якщо у такій посудині зробити тонкий отвір, то через нього перпендикулярно до площини посудини буде виходити частина молекул і рухатися у просторі. Щоб не порушувати рівновагу в кількості молекул у посудині доцільно створити умови для їх поповнення. Зокрема, якщо

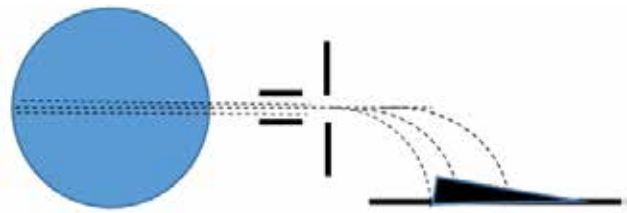


Рис. 1. Принципова схема досліду

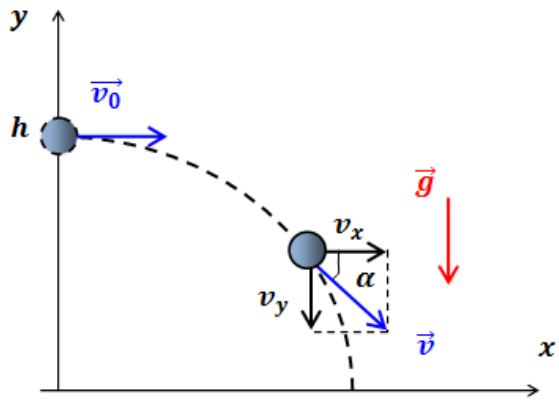


Рис. 2. Зображення руху

використати водяну пару як ідеальний газ, то поповнення молекул можна забезпечити поміщенням у посудину частини води, яка буде випаровуватися. Для забезпечення незмінної концентрації частинок водяної пари у посудині необхідно підтримувати постійність його температури.

Дослідна частина полягає у наступному. Для спрощення ми обрали варіант горизонтального руху частинок, де дальність польоту буде пропорційною швидкості. В інших випадках така залежність не буде пропорційною. Частина рухомих молекул через отвір у посудині вилітають в навколишній простір. Щоб утворився вузький і горизонтально спрямований пучок молекул скористаємося обмежувальними діафрагмами: попарними паралельними пластинками – одну пару горизонтально розміщеними, а другу – вертикально (рис. 1).

Розглядаємо ту частину виділеного пучка молекул, які пройшли своєрідний відбір діафрагмами та потрапили у поле земного тяжіння. Завдяки різній швидкості молекули мають різну кінетичну енергію, а тому і різну траєкторію руху (рис. 2). Маємо класичний випадок руху тіла горизонтально.

За формулою $L = \upsilon_o \sqrt{\frac{2H}{g}} = C\upsilon_o$ визначається дальність польоту молекули, що вилітає з посудини горизонтально зі швидкістю υ_o під дією сили тяжіння (Жихарєв, 2017). Вираз під коренем є постійною величиною за незмінної висоти та позначений *C*. Так як швидкості молекул, які вилітають з отвору посудини підлягають розподілу Максвелла, то доцільно визначити дальність польоту молекул, що окремо мають середньоарифметичну, середньоквадратичну та найбільш ймовірну швидкості. Температуру забезпечуємо незмінною.

Для реєстрації частинок, що падають на горизонтальну площину, а відповідно і дальність польоту є декілька способів. Візьмемо за робоче тіло водяну пару. Виріжемо з промокального паперу прямокутну форму і покриємо її речовиною, яка при взаємодії з водяною парою змінює свій колір або просто змочується. У такий спосіб виокремлюємо площу досліджуваної поверхні, місце, куди потрапили частинки, яка показує густину розподілу їх на цій поверхні. Найбільш густіший шар припадає на частину поверхні з найбільш ймовірною швидкістю, зліва поверхня, куди потрапляють

Рис. 3. Розподіл молекул на площині

частинки з середньоарифметичною, а справа – з средньоквадратичною швидкістю (рис. 3).

Аналіз одержаних у віртуальному досліді даних показує досить виокремлені три частини: зліва осідають молекули з середньоарифметичною швидкістю, в середній частині – найбільш ймовірнісною і справа – середньоквадратичною швидкістю, що якісно підтверджує математичну модель розподілу молекул Максвелла.

Головне виділити місця, куди будуть потрапляти молекули, що мають різну швидкість. Віртуальні досліди можна запропонувати суб'єктам навчання для різних речовин. Так для азоту 28,0134 г/моль, середньоарифметична швидкість дорівнює 476,28 м/с, середньоквадратична швидкість – 516,82 м/с; найбільш ймовірнісна – 422,8 м/с. Для вуглекислого газу CO_2 – 44,01 г/моль, середньоарифметична – 363 м/с, середньоквадратична – 410 м/с, найбільш ймовірнісна – 557 м/с; кисень O_2 – 32 г/моль, середньоарифметична – 425 м/с, середньоквадратична – 480 м/с, найбільш ймовірнісна – 393 м/с; повітря – 29 г/моль, середньоарифметична – 467 м/с, середньоквадратична – 508 м/с, найбільш ймовірнісна – 414 м/с; водяна пара – 18,016 г/моль, середньоарифметична – 566 м/с, середньоквадратична – 640 м/с, найбільш ймовірнісна – 525 м/с.

Висновки і перспективи подальших досліджень. Запропоновані віртуальні досліди можна виконати в комп'ютерному варіанті. Код програми не є складними. Одержані результати пропонованого варіанту досліду є переконливими у наочному зображенні розподілу молекул за швидкостями, наочно розкривають фізичний зміст середньоарифметичної, найбільш ймовірної та середньоквадратичної швидкостей.

У подальшому дослідження доцільно проводити в напрямку модернізації такого виду дослідів та з'ясування фізичної суті понять імпульсу, тиску кінетичної енергії молекул газу.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Жихарєв В. М. Молекулярна фізика і термодинамічні властивості речовин. Ч. 1: Молекулярно-кінетична теорія ідеального газу: навч.-метод. посібник. Ужгород, УжНУ, 2017. 102 с.

2. Конспект лекцій з курсу «Молекулярна фізика і термодинаміка» для студентів напряму 6.040203 «Фізика» /Укл. Харитонова О.А., Борисова Г.В. Дніпродзержинськ: ДДТУ, 2016. 82 с.

3. Садовий М. І., Трифонова О. М. Історія фізики з перших етапів становлення до початку XXI століття: навч. посібн. 2-ге вид. переробл. та доп. Кіровоград: ПП «ЦОП «Авангард», 2013. 436 с.

4. Садовий М. І., Резіна О. В., Трифонова О. М. Використання комп'ютерної графіки під час навчання фізики і технічних дисциплін в педагогічних університетах. *Інформаційні технології і засоби навчання*. 2020. Вип. 80 (6). С. 188–206. DOI: https://doi.org/10.33407/itlt.v80i6.3740.

5. Хомутенко М. В., Садовий М. І., Трифонова О. М. Комп'ютерне моделювання процесів в атомному ядрі. *Інформаційні технології і засоби навчання.* 2015. Вип. 45 (1). С. 78–92. DOI: https://doi.org/10.33407/itlt.v45i1.1191.

6. Школа О. В. Методичні підходи до вивчення розподілу Максвелла-Больцмана в курсі теоретичної фізики. *Вісник Чернігівського національного педагогічного університету. Педагогічні науки*. 2013. Вип. 109. С. 294–298.

7. Ftáčnik J., Lichard P., Přsút J. A simple computer simulation of molecular collisions leading to Maxwell distribution. *European Journal of Physics*. 1983. vol. 4, pp. 68–71. DOI: https://doi.org/10.1088/0143-0807/4/2/002.

8. Krobthong Th. Teaching University Physics by Using Interactive Science Simulations Methods. *Procedia – Social and Behavioral Sciences*. 2015. vol. 197. P. 1811–1817. DOI: https://doi.org/10.1016/j.sbspro.2015.07.240.

9. LibreTexts. URL: https://ukrayinska.libretexts.org.

10. Sadovyi M. Digitization of the experiment in natural sciences as a means of information and digital competence formation of specialists in professional education. *Modern Technologies in the Education System*: monograph. Katowice, 2019. P. 203–210. URL: http://surl.li/elare.

REFERENCES:

1. Zhykharyev, V.M. (2017). Molekulyarna fizyka i termodynamichni vlastyvosti rechovyn [Molecular physics and thermodynamic properties of substances]. Uzhhorod: UzhNU. 102 s [in Ukrainian].

2. Kharytonova, O.A., & Borysova, H.V. (2016). Konspekt lektsiy z kursu «Molekulyarna fizyka i termodynamika» dlya studentiv napryamu 6.040203 «Fizyka» [Synopsis of lectures from the course «Molecular physics and thermodynamics» for students of the direction 6.040203 «Physics»]. Dniprodzerzhyns′k: DDTU. 82 s [in Ukrainian].

3. Sadovyy, M.I., & Tryfonova, O.M. (2013). Istoriya fizyky z pershykh etapiv stanovlennya do pochatku XXI stolittya [The history of physics from the first stages of formation to the beginning of the 21st century]. Kirovohrad: Avanhard. 436 s [in Ukrainian].

4. Sadovyi, M.I., Rezina, O.V., & Tryfonova, O.M. (2020). Vykorystannya komp'yuternoyi hrafiky pid chas navchannya fizyky i tekhnichnykh dystsyplin v pedahohichnykh universytetakh [he use of computer graphics during the teaching of physics and technical disciplines in pedagogical universities]. *Informatsiyni tekhnolohiyi i zasoby navchannya*. 80 (6). 188–206. DOI: https://doi.org/10.33407/itlt.v80i6.3740 [in Ukrainian].

5. Khomutenko, M.V., Sadovyi, M.I., & Tryfonova, O.M. (2015). Komp'yuterne modelyuvannya protsesiv v atomnomu yadri [Computer modeling of processes in the atomic nucleus]. *Informatsiyni tekhnolohiyi i zasoby navchannya*. 45 (1). 78–92. DOI: https://doi.org/10.33407/itlt.v45i1.1191 [in Ukrainian].

6. Shkola, O.V. (2013). Metodychni pidkhody do vyvchennya rozpodilu Maksvella-Bol′tsmana v kursi teoretychnoyi fizyky [Methodical approaches to the study of the Maxwell-Boltzmann distribution in the course of theoretical physics]. *Visnyk Chernihivs'koho natsional'noho pedahohichnoho universytetu. Pedahohichni nauky*. 109. 294–298 [in Ukrainian].

7. Ftáčnik J., Lichard P., & Přsút J. (1983). A simple computer simulation of molecular collisions leading to Maxwell distribution. *European Journal of Physics*. vol. 4, pp. 68–71. DOI: https://doi.org/10.1088/0143-0807/4/2/002.

8. Krobthong, Th. (2015). Teaching University Physics by Using Interactive Science Simulations Methods. *Procedia – Social and Behavioral Sciences*. vol. 197. P. 1811–1817. DOI: https://doi.org/10.1016/j.sbspro.2015.07.240.

9. LibreTexts. Retrieved from https://ukrayinska.libretexts.org [in Ukrainian].

10. Sadovyi, M. (2019). Digitization of the experiment in natural sciences as a means of information and digital competence formation of specialists in professional education. *Modern Technologies in the Education System*: monograph. Katowice. P. 203–210. Retrieved from http://surl.li/elare [in Ukrainian].

UDC 0.04+530
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-8

Petro TROKHIMCHUCK
Ph.D., Associate Professor, Associate Professor at the Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0003-2737-0506*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 8383601100*

Oleh VILIHURSKYI
Senior Lecturer at the Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0009-0008-3763-2577*

Oksana ZAMURUIEVA
Ph.D., Associate Professor, Associate Professor at the Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
***ORCID ID:** https://orcid.org/0000-0003-0032-0613*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 56181742100*

Pavlo SAKHNYUK
Postgraduate student at the Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

Andrew IVANOVSYI
Student at the Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

To cite this article: Trokhimchuck, P., Vilihurskyi, O., Zamuruieva, O., Sakhnyuk, P., Ivanovsyi, A. (2024). Osnovni problemy rozvytku kompiuternykh nauk ta neobkhidnist vkliuchennia fizychnykh protsesiv [Main problems of development the computer science and necessity of the application of physical processes]. *Physics and Educational Technology*, 1, 63–73, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-8

MAIN PROBLEMS OF DEVELOPMENT THE COMPUTER SCIENCE AND NECESSITY OF THE APPLICATION OF PHYSICAL PROCESSES

The problems of evolution the cybernetics and computer science are analysed. Short historical analysis of this problem is represented. It includes Greek abacus and the Peruvian system of nodal counting. The role of Blaise Pascal and Wilhelm Leitzbnitz in establishing the foundations of computer science is noted. The next stage in the development of computer science was the research of Charles Babbage and Lady Ada Lovelace. It was Ada Lovelace, who initiated the programming procedure. The concept of cybernetics as the management of ships originated in Greece. In the 19th century, it was formulated as a science of management by J. Ampere and B. Trentowski. It was completed by N. Wiener, according to whom cybernetics is the science of control in the living and non-living world. Later, cybernetics became the basis of computing. In its bowels, the theory of automatic regulation was expanded and the foundations of modern information theory were formulated. As F. George showed, cybernetics is a synthetic science that includes a number of sciences that are needed to solve the relevant problem. Research has been conducted on the development of the hardware base of modern cybernetics and computer science: from pebbles, nodules and bones to modern optoelectronic systems. Modern computer science has a somewhat broader meaning as defined by N. Wiener. The main task of modern computer science is the formalization of the thesis of the Canadian philosopher L. Hall "Everything that comes from the head is intelligent". In this case, along with the elementary base, programming received significant development. Along with narrow-profile programming languages (Fortran, Pascal), the system programming languages C and cross-hierarchical programming (Python have been created). The structure of computer science has also changed significantly. The further development of computer systems is obviously related to the reduction of time and simplification of the procedure for obtaining the necessary information and including the real physical processes in the procedure of computation. Possible ways of implementing this are also discussed.

***Key words:** cybernetics, computer science, evolution, hardware, software, polymetrical analysis, Python.*

Петро ТРОХИМЧУК
кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська область, Україна, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0003-2737-0506*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 8383601100*

Олег ВІЛІГУРСЬКИЙ
старший викладач кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська область, Україна, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0009-0008-3763-2577*

Оксана ЗАМУРУЄВА
кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська область, Україна, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0003-0032-0613*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 56181742100*

Павло САХНЮК
аспірант кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська область, Україна, 43025

Андрій ІВАНОВСЬКИЙ
студент Навчально-наукового фізико-технологічного інституту Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська область, Україна, 43025

Бібліографічний опис статті: Трохимчук, П., Вілігурський, О., Замуруєва, О., Сахнюк, П., Івановський, А. (2024). Основні проблеми розвитку комп'ютерних наук та необхідність включення фізичних процесів. *Фізика та освітні технології*, 1, 63–73, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-8

ОСНОВНІ ПРОБЛЕМИ РОЗВИТКУ КОМП'ЮТЕРНИХ НАУК ТА НЕОБХІДНІСТЬ ВКЛЮЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Аналізуються проблеми еволюції кібернетики та інформатики. Подано короткий історичний аналіз цієї проблеми. Сюди входить грецька рахівниця, перуанська система підрахунку вузлів. Відзначається роль Блеза Паскаля і Вільгельма Ляйбніца у створенні основ інформатики. Наступним етапом у розвитку інформатики стали дослідження Чарльза Беббіджа та леді Ади Лавлейс. Саме Ада Лавлейс ініціювала процедуру створення програмування. Поняття кібернетики як управління кораблями виникло в Греції. У 19 столітті вона була сформульована як наука про управління Дж. Ампером і Б. Трентовським. Його завершив Н. Вінер, згідно з яким, кібернетика – це наука про управління живим і неживим світом. Пізніше кібернетика стала основою обчислювальної техніки. В її надрах було розширено теорію автоматичного регулювання та сформульовано основи сучасної теорії інформації. Як показав Ф. Джордж, кібернетика є синтетичною наукою, яка включає ряд наук, необхідних для розв'язання відповідної проблеми. Проведено дослідження щодо розвитку апаратної бази сучасної кібернетики та інформатики: від камінчиків, вузликів і кісток до сучасних оптоелектронних систем. Сучасна інформатика має дещо ширше значення за визначенням Н. Вінера. Основним завданням сучасної інформатики є формалізація тези канадського філософа Л. Холла «Все, що йде від голови, є розумним». При цьому поряд з елементарною базою значний розвиток отримало програмування. Поряд з вузькопрофільними мовами програмування (Fortran, Pascal) були створені мови системного програмування Сб C^{++} і міжієрархічного програмування (Python). Значно змінилась і структура комп'ютерних наук. Подальший розвиток комп'ютерних систем, очевидно, пов'язаний зі скороченням часу та спрощенням процедури отримання необхідної інформації і включення реальних фізичних процесів у процедуру обчислення. Також обговорюються можливі шляхи її реалізації.

***Ключові слова:** синтез, кібернетика, інформатика, штучний інтелект, системний аналіз, поліметричний аналіз, принцип Моісеєва, Пайтон.*

Introduction. When delving into the core issues of evolution in cybernetics and computer science, we must consider several key aspects: computation problems, the organization of these calculations, and the potential applications thereof. These facets are intricately linked to the level of civilization's development throughout history, persisting to varying degrees across epochs. Hence, our exploration of the evolution of cybernetics and informatics will be anchored in this perspective.

A concise historical examination is imperative, encompassing a wide array of civilizations such as Ancient Egyptian, Sumerian, Indian, Chinese, and others. This journey traverses mythological narratives, Pythagorean theories, Plato's philosophical constructs, as well as practical systems like the Greek abacus and the Peruvian nodal counting system [Trokhimchuck, 2021; History, 2023].

Acknowledgment is due to Blaise Pascal and Wilhelm Leitzbnitz for their seminal roles in laying the groundwork for computer science. Their contributions, highlighted in various sources [Trokhimchuck, 2021; George, 1976], set a crucial precedent.

Following in the footsteps of computer science pioneers, Charles Babbage and Lady Ada Lovelace embarked on groundbreaking research, with Lovelace's introduction of programming procedures marking a significant milestone in this narrative [George, 1976].

The genesis of cybernetics, initially conceived as ship management in Ancient Greece, evolved into a formal science in the 19th century, notably formulated by F.-M. Ampere and B. Trentowski [Trokhimchuck, 2021; Computing, 2023]. N. Wiener further elaborated on cybernetics, defining it as the science of control in both living and non-living systems [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021]. This discipline later formed the foundation of computing, nurturing the growth of automatic regulation theory and modern information theory. As elucidated by F. George [5], cybernetics emerges as a synthetic science, amalgamating various disciplines necessary to tackle pertinent problems.

Research efforts have been dedicated to the hardware evolution of modern cybernetics and computer science, spanning from rudimentary materials like pebbles, nodules, and bones to contemporary optoelectronic systems [Trokhimchuck, 2021, History, 2023].

Modern computer science, as articulated by N. Wiener [Trokhimchuck, 2021], encompasses a broader spectrum of meanings. Its primary objective lies in formalizing the thesis of Canadian philosopher L. Hall, asserting that "Everything that comes from the head is intelligent" [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021]. This evolution has significantly advanced programming, evident in the development of specialized languages like Fortran and Pascal [History, 2023], alongside system programming languages such as C and cross-hierarchical programming like Python [Zamuruyeva, 2018; Zamuruyeva, 2020].

The structural landscape of computer science has undergone significant transformations, closely linked to the quest for reduced time and streamlined procedures in acquiring necessary information [Trokhimchuck, 2021]. Potential implementation avenues for these advancements are also under discussion.

Main Results. The roots of computer science extend far back in history, often manifesting in disciplines like mathematics and physics long before the formal establishment of the field [History, 2023]. These early developments, ranging from mechanical inventions to mathematical theories, laid the groundwork for what we now recognize as computer science. This progression ushered in a major academic domain, significant technological leaps across the Western world, and the foundation of a global trade and cultural exchange network.

An exploration into the evolution of computing methods and systems inevitably commences with ancient civilizations [Trokhimchuck, 2021]. In Ancient Egypt, for instance, the groundwork for algebraic principles was laid, alongside the creation of a universal coded system of calculations known as the tablet of the god Thoth [Trokhimchuck, 2021]. This tablet, attributed to the deity Thoth, played a pivotal role in teaching Egyptians counting, writing, and agricultural practices, akin to a rudimentary form of computational instruction.

Ancient Sumer contributed significantly to early computational knowledge, with developments ranging from spherical geometry and astrology to matrix arithmetic and the invention of the abacus [Trokhimchuck, 2021]. The abacus, in particular, emerged as the earliest known computational tool, originating between 2700 and 2300 BCE.

Sumerians devised a primitive form consisting of successive columns, delineating orders of magnitude within their sexagesimal number system. Initially employed with pebbles on sand-drawn lines, the abacus has evolved into more modern iterations, including the Chinese abacus still utilized today [Trokhimchuck, 2021; History, 2023].

In the 5th century BC, Ancient India witnessed the remarkable feat of the grammarian Pāṇini, who meticulously crafted the Sanskrit grammar into 959 rules encapsulated within the Ashtadhyayi. Pāṇini's work was characterized by its high degree of systemization and technical precision, employing metarules, transformations, and recursions [History, 2023].

The renowned phrase "Numbers rule the world" is attributed to Pythagoras, whose school delved deeply into numerical concepts. The Pythagorean tradition, serving as a nexus between various ancient systems, synthesized elements of the esoteric Egyptian rituals with the more overt traditions of Sumer and India [Trokhimchuck, 2021]. German archaeologists in 1980-8 uncovered cities featuring octagonal and semi-octagonal structures, dating back to the 6th – 5th centuries BC, possibly indicating the presence of the enigmatic Pythagoreans [Trokhimchuck, 2021].

Plato, the eminent philosopher, held mathematics in high regard, emphasizing its significance in his philosophical framework. His categorization of numbers marked an early attempt to systemize existing knowledge through mathematical principles. According to Plato, numbers could be classified into three types: mathematical (representing pure mathematics), sensory (applied mathematics), and ideal (pertaining to numerology and the numerical encoding of information, from a modern perspective) [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021].

The classifications of Aristotle and Euclid played a significant role in the development of modern science. Thanks to Aristotle, the classification of modern sciences began and the foundations of formal logic were developed, which was the completion of the works of Socrates and Plato [Trokhimchuck, 2021]. From this point of view, formal logic can be considered formalized rules for conducting a dispute. Euclid first classified mathematical disciplines and created an axiomatic method of their description, which is practically relevant in successful mathematics [Trokhimchuck, 2021].

The establishment of science was significantly influenced by the organizational structure of the Alexandria Museum, founded in Alexandria, Egypt by a confidant of Alexander the Great [Trokhimchuck, 2021]. Spanning from the 3rd century BC to the 4th century AD, this institution served as a bastion for the advancement of Hellenic culture, fostering scientific development along the philosophical lines delineated by Plato and Aristotle, the latter being a mentor to Ptolemy [History, 2023].

An early marvel of mechanical ingenuity, the Antikythera mechanism, is believed to have functioned as an analog computer, facilitating astronomical calculations. Discovered in 1901 amidst the wreckage off the Greek island of Antikythera, this device has been dated to approximately 100 BC [History, 2023].

The legacy of the Alexandria Museum found continuity within the Muslim world, spanning regions such as the Baghdad Caliphate, Merage, Morocco, Cordoba, and Granada [Trokhimchuck, 2021]. Islam, under the teachings of Mohammed, advocated for universal learning, fostering an environment more conducive to scientific inquiry compared to medieval Christianity. It was during the Renaissance that these traditions experienced a resurgence within Christian territories, partly due to the Crusades and cultural exchanges with the Islamic world [Trokhimchuck, 2021]. Notably, Greek Alexandrian manuscripts were translated into Latin not directly from Greek but via Arabic translations [Trokhimchuck, 2021].

The resurgence of mechanical analog computing emerged in the medieval Islamic world, where Muslim astronomers such as Abū Rayhān al-Bīrūnī and Jabir ibn Aflah developed intricate devices like the mechanical geared astrolabe and the torquetum [History, 2023]. Additionally, Muslim mathematicians made significant strides in cryptography, including advancements in cryptanalysis and frequency analysis attributed to figures like Alkindus. Further innovations included programmable machines like the automatic flute player, attributed to the Banū Mūsā brothers [History, 2023].

The early exploration of cybernetic principles saw the contributions of notable figures such as Su Song, Heron of Alexandria, and Ctesibius, with the latter credited for inventing the first artificial automatic control system in the form of a water clock [History, 2023]. However, it was in Europe where

the foundations of modern computing science and its ideological underpinnings were further developed [Trokhimchuck, 2021; History, 2023].

Remarkable advancements in mechanical engineering emerged in the 12th century with the construction of the first mechanical robot capable of articulating basic words by R. Bacon [Trokhimchuck, 2021]. Subsequently, in 14th century Europe, technological artifacts of comparable complexity emerged, exemplified by the creation of mechanical astronomical clocks [History, 2023].

The advent of logarithms by John Napier in the early 17th century marked a significant milestone, prompting a surge in innovation among inventors and scientists in the realm of computational tools. In 1623, Wilhelm Schickard conceived a calculating machine, although his project was tragically thwarted by a fire in 1624 [History, 2023]. Blaise Pascal continued this trajectory by designing a mechanical adding device circa 1640, inspired by the work of the ancient mathematician Hero of Alexandria [History, 2023]. Gottfried Wilhelm Leibniz furthered these endeavors with the invention of the Stepped Reckoner in 1672, culminating in its completion in 1694 [History, 2023].

The 17th century witnessed the formulation of foundational rules for constructing theories, exemplified by Descartes' method and Newton's four rules of inference in physics, akin to the procedure of Euclidean axiomatization [Trokhimchuck, 2021]. This development facilitated the realization of R. Bacon's assertion that "science is as much science as there is mathematics in it" [Trokhimchuck, 2021].

Charles Babbage stands out as a pivotal figure in the annals of computing history, often hailed as one of its earliest pioneers [George, 1976]. Beginning in the 1810s, Babbage conceived a vision of mechanized computation, leading to the design of a calculator capable of computing numbers up to 8 decimal points in length [George, 1976]. Expanding on this concept, Babbage envisioned a machine capable of computing numbers with up to 20 decimal places, culminating in his proposal for the "Analytical Engine" by the 1830s [George, 1976]. This visionary device, utilizing punched cards for arithmetical operations and employing sequential control, represented the first true manifestation of the modern computer [George, 1976].

Ada Lovelace, also known as Augusta Ada Byron, is acclaimed as the trailblazer of computer programming, esteemed for her mathematical prowess. Collaborating with Charles Babbage as his assistant during his endeavor with the "Analytical Engine," the first mechanical computer, Lovelace made significant contributions to the nascent field [George, 1976]. Notably, she devised the first computer algorithm, capable of computing Bernoulli numbers, although the precedence of algorithm design is subject to debate, as Babbage had earlier designed the difference engine and corresponding algorithms based on differences [George, 1976]. Additionally, Lovelace foresaw the future capabilities of computers, envisioning them not only as calculators but also as manipulators of symbols, whether mathematical or otherwise. Despite her untimely passing before witnessing the fruition of her ideas, Lovelace's pioneering efforts from the 1840s onwards left an indelible mark on the field [George, 1976].

Subsequent to Babbage's work, Percy Ludgate, a clerk to a Dublin corn merchant, independently conceived a programmable mechanical computer, which he documented in a publication in 1909 [History, 2023]. Further advancements drew inspiration from Babbage's legacy, exemplified by the endeavors of Leonardo Torres Quevedo and Vannevar Bush [History, 2023]. Torres Quevedo proposed an analytical electromechanical machine controlled by a read-only program, introducing the concept of floating-point arithmetic. In 1920, he presented the Electromechanical Arithmometer in Paris, featuring an arithmetic unit connected to a typewriter for automatic command input and result printing. Bush, in his work "Instrumental Analysis" (1916), explored the adaptation of IBM punch card machines to realize Babbage's designs, and subsequently initiated the Rapid Arithmetical Machine project in pursuit of an electronic digital computer [History, 2023].

The evolution of electronic computing gained momentum in the 1930s with the emergence of switching circuit theory, heralding a departure from ad hoc electrical engineering practices [History, 2023]. Through a series of papers published between 1934 and 1936, luminaries such as Akira Nakashima, Claude Shannon, and Viktor Shetakov demonstrated the applicability of two-valued Boolean algebra in describing the operations of switching circuits [History, 2023]. This seminal concept laid the groundwork for electronic digital computers, providing the theoretical

framework for digital system design across diverse domains of modern technology.

During his undergraduate philosophy studies, Shannon encountered the work of George Boole, realizing its applicability in arranging electromechanical relays, commonly used in telephone routing switches, to solve logic problems. This insight formed the basis of practical digital circuit design, gaining widespread recognition within the electrical engineering community during and after World War II [History, 2023].

The advent of digital machines, unbound by physical constraints inherent in analog devices, facilitated the development of logical computers capable of executing tasks describable as "purely mechanical." Alan Turing's theoretical construct, the Turing Machine, emerged as a pivotal device for studying the properties of such hardware [Computer, 2023; Computing, 2023; History, 2023].

The inception of modern computer science saw its mathematical foundations laid by Kurt Gödel with his incompleteness theorem in 1931 [Trokhimchuck, 2021]. Gödel demonstrated the inherent limits of formal systems in proving or disproving propositions, prompting further exploration into defining and describing these systems, including the introduction of concepts such as mu-recursive functions and lambda-definable functions [History, 2023].

In 1936, Alan Turing and Alonzo Church independently, and collaboratively, formalized the concept of an algorithm and its computational limits, alongside proposing a model for "purely mechanical" computation [Computer, 2023; Computing, 2023; History, 2023]. This seminal contribution culminated in the formulation of the Church-Turing thesis, positing the capabilities of mechanical calculation devices, such as electronic computers, to perform any feasible calculation provided adequate time and storage resources.

Alan Turing's profound impact on computer science extended to the publication of his seminal work on Turing machines in 1936, introducing the Universal Turing machine, which laid the groundwork for modern computers. Turing machines, abstract digital computing devices, pioneered the concept of the stored program, defining the scope of computability within established limitations on computing ability. Tasks solvable by a Turing machine are deemed Turing computable [Computer, 2023; Computing, 2023; History, 2023].

Stanley Frankel, a physicist at Los Alamos, underscored John von Neumann's recognition of the pivotal significance of Turing's 1936 paper. Von Neumann, well aware of its importance around 1943 or 1944, introduced Frankel to the paper and urged him to study it diligently. Although von Neumann is often lauded as the "father of the computer" in the modern sense, Frankel emphasized that von Neumann himself would reject such a claim, attributing the fundamental conception to Turing [History, 2023].

John V. Atanasoff's contribution to computing history is marked by the creation of the Atanasoff-Berry computer, recognized as the first electric digital computer. Constructed between 1939 and 1942 on the Iowa State campus by Atanasoff, a professor of physics and mathematics, and Clifford Berry, an engineering graduate student, this pioneering device laid the groundwork for subsequent developments in electronic computing [History, 2023].

Konrad Zuse's pioneering work further advanced the field of computing with the development of the Z3 in 1941, hailed as the world's first functional program-controlled computer. Demonstrated to be Turing-complete in principle by 1948, the Z3 showcased Zuse's innovative prowess in computer engineering. Additionally, Zuse's contributions extended to the creation of the S2 computing machine and the development of the Z4, recognized as the world's first commercial computer. Zuse's legacy is further enriched by his design of the Plankalkül, the first high-level programming language, in 1946 [History, 2023].

The completion of the Manchester Baby in 1948 marked a significant milestone in electronic computing history, as it became the world's first electronic digital computer capable of running programs stored in its memory, a feature characteristic of modern computers. Max Newman's influence, stemming from Turing's seminal work on Turing Machines and his logico-mathematical contributions, played a crucial role in the successful development of the Manchester Baby [History, 2023].

Britain's National Physical Laboratory furthered Turing's philosophies with the completion of the Pilot ACE in 1950, a programmable computer based on Turing's principles. With an operating speed of 1 MHz, the Pilot Model ACE held the distinction of being the fastest computer globally for a period. Turing's design for ACE foreshadowed elements of modern RISC architectures

and featured a high-speed memory comparable in capacity to early Macintosh computers, setting it apart from its contemporaries [History, 2023].

Claude Shannon played a pivotal role in the establishment of information theory [Trokhimchuck, 2021]. The genesis of the term "computer bug" traces back to an actual moth found lodged between the relays of the Harvard Mark II, although the attribution of the term to Grace Hopper is erroneous. Accounts vary regarding the date of this incident, with some indicating September 9, 1945, and others citing September 9, 1947, when operators officially logged the occurrence [History, 2023].

The interdisciplinary field of cybernetics integrates diverse disciplines such as control systems, biology, neurology, and mechanical engineering. Engineer Harold Black's seminal contributions in 1927, outlining the use of negative feedback to control amplifiers, laid the groundwork for electronic control systems, later applied in military applications during World War II [Trokhimchuck, 2021; History, 2023]. The formalization of cybernetics as a distinct field emerged around 1940, catalyzed by the works of eminent scientists including W. Ashby, W. Walter, McCulloch, and N. Wiener [Trokhimchuck, 2021, History, 2023]. Notably, John von Neumann's addition of the concept of cellular automata and self-reproduction significantly advanced cybernetics. Often hailed as the father of cybernetics, N. Wiener published the seminal book "Cybernetics" in 1948 [Trokhimchuck, 2021].

A rudimentary schema of cybernetics as a synthetic science is depicted in Figure 1 [George, 1977].

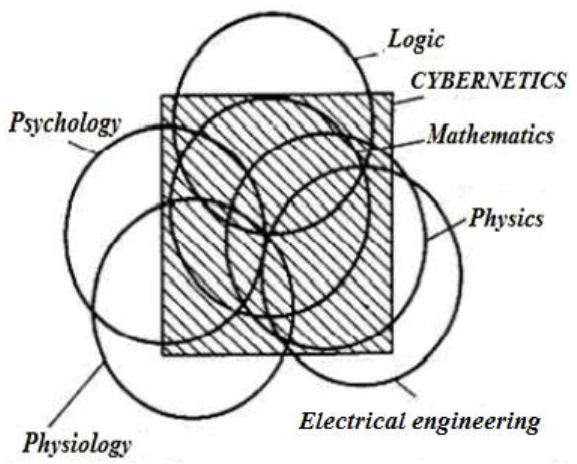


Fig. 1. A scheme that roughly illustrates the areas of intersection of the main disciplines that feed cybernetics [George, 1977]

Certainly, the synthesis of cybernetics has evolved over time, branching into various domains such as physical cybernetics, economical cybernetics, and more [Trokhimchuck, 2021].

The term "artificial intelligence" was coined by John McCarthy to encapsulate the research undertaken for a proposal at the Dartmouth Summer Research Project in 1955 [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016]. This terminology marked the birth of a new field in computer science. The research project, initiated by McCarthy, Marvin L. Minsky, Nathaniel Rochester, and Claude E. Shannon, officially commenced in 1956, comprising several significant components aimed at elucidating the nature of artificial intelligence [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016].

The foundational idea behind automatic computers, as envisioned by McCarthy and his colleagues, was rooted in the notion that if a task could be performed by a machine, then it should be achievable through the compilation of a corresponding program [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016]. However, they recognized the immense complexity of the human brain, which posed challenges in replicating its functionality through programming [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016].

Their approach involved examining how humans comprehend language and sentence structures, and then devising algorithms to emulate these processes within a machine [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016]. However, this necessitated a profound understanding of hardware-level language, typically expressed in binary code, to impart the requisite ruleset for executing specific tasks [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016].

Minsky's exploration delved into organizing artificial neural networks to emulate human brain-like qualities, yet he encountered limitations in achieving comprehensive results, indicating the need for further research in this area [Nillson,

1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016]. Similarly, McCarthy and Shannon sought to gauge machine efficiency through mathematical theory and computations applied to complex problems, but they too faced obstacles in obtaining complete test results [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016].

The concept of self-improvement postulated the use of self-modifying code to enhance a machine's intelligence and speed of calculation, envisioning machines capable of autonomously increasing their cognitive capacities [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023, Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016]. This theoretical framework prompted exploration into machine learning algorithms aimed at refining task completion processes.

Further subdivision of research into smaller groups, including sensory perception and other facets of artificial intelligence, was proposed to facilitate comprehensive investigations [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023]. Abstractions in computer science encompass mathematical concepts and programming languages, offering avenues for studying the fundamental principles underlying computational processes [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023].

The notion of computational creativity revolved around exploring how machines could emulate human-like thinking patterns to enhance problem-solving capabilities, particularly in scenarios involving incomplete information [Nillson, 1998; Nillson, 2010; Computer, 2023; Computing, 2023; Ifrah, 2021; Koetsier, 2001; Rendall, 1982; O'Regan, 2016].

In the realm of computational sciences, logic played a pivotal role, with developments tracing back to Leibniz's pursuit of a universal calculus through formal logic [Trokhimchuck, 2021]. The advent of Boolean logic in the 19th century introduced binary systems to computer science, paving the way for more complex logical frameworks, such as Russell's inductive logic types [Trokhimchuck, 2021]. Despite these advancements, Gödel's incompleteness theorems underscored the limitations of relying solely on logic as the foundation of mathematics and computer science, prompting a shift towards an organismic approach [Trokhimchuck, 2021]. Gödel's theorems are regarded by some as integral components of the theoretical framework of computer science [Trokhimchuck, 2021].

The evolution of general theoretical approaches in computer science can be elucidated through the lens of foundational works such as S. C. Kleene's "Metamathematics" [Kleene, 1965] and S. Wolfram's seminal contributions [Wolfram, 2022]. Kleene's work primarily emphasizes logical doctrines, whereas Wolfram's approach, as highlighted in his book, emphasizes a spectrum of mathematical disciplines fundamental to computer programs, with an intuitionistic orientation [Wolfram, 2022].

Wolfram further underscores the necessity of bridging computer science with physics, positing that computational procedures are inherently linked to corresponding physical processes [Wolfram, 2022]. This assertion reflects a broader trend toward integrating mathematical and physical principles within the computational paradigm.

However, the contemporary scientific landscape suggests that this integration alone may not suffice. Many voices have advocated for a deeper convergence of mathematics and physics, giving rise to fields such as physical cybernetics. This underscores the notion that a return to the Euclid-Newtonian paradigm in computer science may not be the most fruitful path forward, necessitating a nuanced consideration of past research achievements and their implications [Trokhimchuck, 2021].

We can talk about the convergence of information theory and physics on the basis of the generalized de Broglie ratio [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021; de Broglie, 1964]

$$\frac{S_a}{\hbar} = \frac{S_e}{k_B} = S_g \qquad (1)$$

about the equality of ordered and disordered information in closed system. Here S_a is an action, S_e – entropy, $\hbar$ – Planck constant, k_B – Boltzmann constant [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021].Therefore, it makes sense to consider dimensionless relations not as elements of dimensionless entropy or action, but as elements of a generalized information [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021].

This ratio is valid for closed systems. For open systems, we can formulate the following principle [Trokhimchuck, 2021]

$$\delta S_g > 0. \qquad (2)$$

If $S_g = S_e$ we have Shennon law of information theory and Klimontovich criterion of open systems.

In addition, relation (1) is the rationale for the introduction of information numerosity (simple, technical and generalized) as the quantifiers of relevant calculation operations, cells as we can see from (1) include relevant quanta of physical processes [Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2021].

The polymetric analysis theory, encompassing physical and other computational processes, presents a multifaceted framework with several key components [Trokhimchuck, 2021]. These include functional numbers, which generalize quadratic forms, and generalized mathematical transformations responsible for both single-hierarchical and multi-hierarchical calculations. Information grids constructed from algebraic combinations of functional numbers and mathematical transformations form another crucial aspect. Additionally, the theory incorporates the principles of information calculations, emphasizing optimal information processing, and integrates theories of measure and dimensionality analysis into a cohesive system. Moreover, the hybrid theory of systems provides practical formalizations of knowledge within this framework [Trokhimchuck, 2021].

Fundamentally, the polymetric analysis theory operates based on two criteria: completeness and simplicity [Trokhimchuck, 2021]. Completeness entails the comprehensive layout of the system, akin to Gödelian completeness, while simplicity ensures an optimal arrangement, balancing the amount of information involved. By leveraging these criteria, polymetric analysis offers a versatile foundation for computer science, akin to Newton's fourth law in physics, which is applicable across various scientific domains [Trokhimchuck, 2021].

Furthermore, the polymetric analysis's variable hierarchy enables the creation of diverse systems akin to those proposed by Kleene and Wolfram [Kleene, 1965; Wolfram, 2022]. While Kleene and Wolfram's approaches are inductive, polymetric analysis adopts a deductive stance, serving as a potential framework for deducing intuitionistic principles [Trokhimchuck, 2021]. This deductification expands the theoretical scope, offering a novel perspective on computational processes and their underlying principles.

In whole Polymetrical Analysis and possible computer sciences must satisfy six conditions with point of conditions, which are formulated for the general theories (theories of everything) [Trokhimchuck, 2021]:

1. It must be open theory or theory with variable hierarchy.
2. This theory must have minimal number of principles.
3. It must be based on nature of mathematics (analysis, synthesis and formalization all possible knowledge).
4. We must create sign structure, which unites verbal and nonverbal knowledge (mathematical and other) in one system.
5. We must have system, which is an expert system of existing system of knowledge and may be used for the creation new systems of knowledge.
6. Principle of continuity must be true for all science.

These conditions may be considered as a more precise representation of famous Newtonian four rules of conclusions in physics [Trokhimchuck, 2021]

They must be used for the creation of any dynamic science, which can be presented as an open system [Trokhimchuck, 2021].

Conclusions

1. The problems of evolution in cybernetics and computer sciences are analyzed.
2. Short historical analysis of this problem in ancient civilizations is conducted.
3. Role antiquity and middle age scientists in the development of computer science is shown.
4. Role of B. Pascal, W. Leibniz, Ch. Babbage and A. Lovelace researches in the development of computer science is discussed.
5. Development of logical line of cybernetics and computer science and its limitations is observed.
6. Evolution of intuitionism line in computer science on the example Kleene and Wolfram systems is represented.
7. Short analysis of Cybernetics as a synthetic system is given.
8. Necessity of application of physical laws (generalizing de Broglie formula) for the creation of a universal theory of computer science is shown.
9. We show the necessity of search of a more universal concept of computer science. This concept is based on six rules. As an example of this concept, polymetric analysis is represented.

REFERENCES:

1. Computer science. Wilkipedia – the free encyclopedia. Retrieved from http:/en.wikipedia.org/wiki/ Computer_ science.
2. Computing. Wilkipedia – the free encyclopedia. Retrieved from http:/en.wikipedia. org / wiki/ Computing.
3. George, F.H. (1977). Foundations of cybernetics. Gordon and Breach Science Publishing, London, Paris, New York, 260.
4. George, F.H. (1976). Philosophical Foundations of Cybernetics. Abacus Press, London, 157.
5. De Broglie, L. (1964). Thermodynamique du point isolé. La thermodynamique cachée des particules. Paris: Gauthier Villars, 98 p.
6. History of computer science – Wikipedia. Retrieved from https://en.wikipedia.org/wiki/ History_of_computer_ science.
7. Ifrah, G. (2021). The Universal History of Computing: From the Abacus to the Quantum Computer.New York: John Wiley @ Sons, 416 p.
8. Kleene, S.C. (1965). Introduction to metamathematics. Amsterdam: North Holland, 550 p.
9. Koetsier, T. (2001). On the prehistory of programmable machines: musical automata, looms, calculators. Mechanism and Machine Theory, Vol. 36, Is. 5, P. 589–603.
10. Nillson, N.I. (1998). Artificial Intelligence. A new synthesis. San Francisco: Morgan Kauffman Publishers, Inc., 514 p.
11. Nillson, N.I. (2010). The Quest for Artificial Intelligence: A History of Ideas and Achievements. Cambridge University Press, New York, 562.
12. O'Regan, G. (2016). Introduction to the History of Computing: A Computing History Primer (Undergraduate Topics in Computer Science). Berlin: Springer Verlag, 317 p.
13. Rendall, B. (1982). From Analytical Engine to Electronic Digital Computer: The Contributions of Ludgate, Torres, and Bush. Annals of the History of Computing, Vol. 4, Is. 4, 20 p.
14. Trentowski, B. (1843). The attitude of philosophy to cybernetics, or the art of governing a nation. Poznan, 196 p.
15. Trokhimchuck, P.P. (2014). Mathematical foundations of knowledge. Polymetric approach. 2nd edition Lutsk: Vezha-Druk, 624 p.
16. Trokhimchuck, P. P.S. (2020). Beer centurial problem in cybernetics and methods of its resolution. In: Advanced in computer science, vol. 7, ch. 5. Ed. Mukesh Singla. New Delhi: AkiNik Publications, P. 87–118.
17. Trokhimchuck, P.P. (2021). Theories of Everythings: Past, Present, Future. Saarbrukken: Lambert Academic Publishing, 260 p.
18. Trokhimchuck, P., Viligurskii, O., & Zamurueva, O. (2022). Some questions of synthei in cybernetics and computer science. Applied Problems of Mathematical Modelling. Vol. 5, Ch.2. P.84–89.
19. Wolfram, S. (2022). Metamathematics: Foundations & Physicalization. Leipzig:Wolfram Media, 456 p.
20. Zamuruieva, O.V., Krymus, A.S., & Olkhova, N.V. (2018). Obiektno-oriientovane prohramuvannia v Python [Object-oriented programming in Python]. Kurs lektsii. Chastyna 1. Lutsk: Vezha-Druk, 64 p [in Ukrainian].
21. Zamurueva, O.V., & Vilihurskyi, O.M. (2020). Obiektno-oriientovane prohramuvannia v Python [Object-oriented programming in Python]. Kurs lektsii. Chastyna 2. Lutsk: Vezha-Druk, 72 p [in Ukrainian].

BIBLIOGRAPHY:

1. Computer science. Wilkipedia – the free encyclopedia. URL: http:/en.wikipedia.org/wiki/ Computer_ science.
2. Computing/ Wilkipedia – the free encyclopedia. URL: http:/en.wikipedia. org / wiki/ Computing.
3. George F. H. Foundations of cybernetics. Gordon and Breach Science Publishing, London, Paris, New York, 1977, 260.
4. George F. H. Philosophical Foundations of Cybernetics. Abacus Press, London, 1976, 157.
5. De Broglie L. Thermodynamique du point isolé. La thermodynamique cachée des particules. Paris: Gauthier Villars, 1964. 98 p.
6. History of computer science – Wikipedia. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/ History_of_computer_science.
7. Ifrah G. The Universal History of Computing: From the Abacus to the Quantum Computer.New York: John Wiley @ Sons, 2021. 416 p.
8. Kleene S. C. Introduction to metamathematics. Amsterdam: North Holland, 1965. 550 p.
9. Koetsier T. On the prehistory of programmable machines: musical automata, looms, calculators. Mechanism and Machine Theory, 2001 Vol. 36, Is. 5, P. 589–603.
10. Nillson N. I. Artificial Intelligence. A new synthesis. San Francisco: Morgan Kauffman Publishers, Inc., 1998. 514 p.

11. Nillson N. I. The Quest for Artificial Intelligence: A History of Ideas and Achievements. Cambridge University Press, New York, 2010, 562.

12. O'Regan G. Introduction to the History of Computing: A Computing History Primer (Undergraduate Topics in Computer Science). Berlin: Springer Verlag, 2016. 317 p.

13. Rendall B. From Analytical Engine to Electronic Digital Computer: The Contributions of Ludgate, Torres, and Bush. Annals of the History of Computing, Vol. 4, Is. 4, 1982, 20 p.

14. Trentowski B. The attitude of philosophy to cybernetics, or the art of governing a nation. Poznan, 1843, 196 p.

15. Trokhimchuck P. P. Mathematical foundations of knowledge. Polymetric approach. 2nd edition Lutsk: Vezha-Druk, 2014, 624 p.

16. Trokhimchuck P. P. S. Beer centurial problem in cybernetics and methods of its resolution. In: Advanced in computer science, vol. 7, ch. 5. Ed. Mukesh Singla. New Delhi: AkiNik Publications, 2020. P. 87–118.

17. Trokhimchuck P. P. Theories of Everythings: Past, Present, Future. Saarbrukken: Lambert Academic Publishing, 2021. 260 p.

18. Trokhimchuck P., Viligurskii O., Zamurueva O. Some questions of synthei in cybernetics and computer science. Applied Problems of Mathematical Modelling. 2022, Vol. 5, Ch.2. P.84–89.

19. Wolfram S. Metamathematics: Foundations & Physicalization. Leipzig:Wolfram Media, 2022. 456 p.

20. Замуруєва О. В., Кримусь А. С., Ольхова Н. В. Об'єктно-орієнтоване програмування в Python. Курс лекцій. Частина 1. Луцьк: Вежа-Друк, 2018. 64 с.

21. Замуруєва О. В., Вілігурський О. М. Об'єктно-орієнтоване програмування в Python. Курс лекцій. Частина 2. Луцьк: Вежа-Друк, 2020. 72 с.

UDC 53.02:621.391:14
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-9

Petro TROKHIMCHUCK
Ph.D., Associate Professor, Associate Professor at the Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0003-2737-0506*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 8383601100*

To cite this article: Trokhimchuck, P. (2024). Do pytannia pro unifikatsiiu osnovnykh zakoniv fizyky ta teorii informatsii [To question about unification the basic laws of physics and information theory]. *Physics and Education Technology*. 1, 74–79, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-9

TO QUESTION ABOUT UNIFICATION THE BASIC LAWS OF PHYSICS AND INFORMATION THEORY

The main problems of unification the basic laws of physics and information theory are discussed. Next aspects of this problem: laws, constants and system, are analyzed. The evolution main universal physical laws from optical Ferma principle to action principle in their historical retrospective is researched. The main thermodynamical principles as Carno theorem, Prigogine-Glensdorf principle are represented. The role of physical constants in the creation universal theories is est note. Stoney and Planck system of fundamental physical constants and its place in modern theory are analyzed. The impact of the development of physical theories on the emergence and development of systems theory is shown. According to E. B. de Condillac, any set of connected elements is a system. Moreover, part of these elements are the principles by which the corresponding system was created. At the same time, the number of principles should be minimal, and preferably one. Information theory is analyzed on the basis of its universal principle – Shannon's theorem. The connection between physics and information theory is shown. For this, the theory of information-physical structures was used. A more universal unification was obtained from the generalization from L. de Broglie's formula about the equivalence of the amount of ordered and disordered information. It is shown that on the basis of a dimensionless quantity that can be interpreted both as a dimensionless action and as a dimensionless entropy, it is possible as a partial case to obtain the basic universal laws of physics and information theory. In this case, the analogy between thermodynamic and information entropy becomes more obvious. Further prospects for the development and application of the proposed methods of unification in in various branches of modern science, including verbal and non-verbal knowledge systems, are analyzed and discussed. The idea of the possibility of creating a unified system of knowledge is also expressed.

***Key words:** unification, de Broglie, Fermat, Maupertuis, Lagrange, Hamilton, Rayleigh, uncertainty principle, physics, information theory, open systems.*

Петро ТРОХИМЧУК
кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська область, Україна, 43025
***ORCID ID**: https://orcid.org/0000-0003-2737-0506*
***SCOPUS-AUTHOR ID:** 8383601100*

Бібліографічний опис статті: Трохимчук, П. (2024). До питання про уніфікацію основних законів фізики та теорії інформації. *Фізика та освітні технології.* 1, 74–79, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-9

ДО ПИТАННЯ ПРО УНІФІКАЦІЮ ОСНОВНИХ ЗАКОНІВ ФІЗИКИ ТА ТЕОРІЇ ІНФОРМАЦІЇ

Обговорюються основні проблеми уніфікації основних законів фізики та теорії інформації. Аналізуються наступні аспекти цієї проблеми: закони, константи та системи. Досліджується еволюція основних універсальних фізичних законів від оптичного принципу Ферма до принципу дії в їх історичній ретроспективі. Повторно наведено основні термодинамічні принципи, такі як теорема Карно, принцип Пригожина-Гленсдорфа. Відзначається роль фізичних констант у створенні універсальних теорій. Проаналізовано систему фундаментальних фізичних констант Стоуні і Планка та її місце в сучасній теорії. Показано вплив розвитку фізичних теорій на виникнення та розвиток теорії

систем. Згідно з Е. Б. де Кондильяком, будь-яка сукупність зв'язаних елементів є системою. Більш того, частина цих елементів є принципами, за якими була створена відповідна система. При цьому кількість принципів має бути мінімальною, а краще – однією. Теорія інформації аналізується на основі її універсального принципу – теореми Шеннона. Показано зв'язок фізики з теорією інформації. Для цього була використана теорія інформаційно-фізичних структур. Більш універсальну уніфікацію отримало узагальнення з формули Л. де Бройля про еквівалентність кількості впорядкованої та невпорядкованої інформації. Показано, що на основі безрозмірної величини, яку можна інтерпретувати як безрозмірну дію, так і як безрозмірну ентропію, можна як частковий випадок отримати основні універсальні закони фізики та теорії інформації. У цьому випадку аналогія між термодинамічною та інформаційною ентропією стає більш очевидною наглядною. Проаналізовано та обговорено подальші перспективи розвитку та застосування запропонованих методів уніфікації в різних галузях сучасної науки, включаючи вербальні та невербальні системи знань. Також висловлюється ідея про можливість створення єдиної системи знань.

Ключові слова: *уніфікація, де Бройль, Ферма, Мопертюї, Лагранж, Гамільтон, Релей, принцип невизначеності, фізика, теорія інформації, відкриті системи.*

Introduction. The problem of unifying the laws of physics and information theory is closely related to the development of theoretical and mathematical physics (Trokhimchuck, 2021). It was in physics that the first universal laws were formulated: Fermat's principle (eikonal theory) (Trokhimchuck, 2021), action principle of least action (Trokhimchuck, 2021), the second law of thermodynamics (Trokhimchuck, 2021).

In his research, C. Shannon derived a quantity that had the same properties as entropy, and on the recommendation of J. von Neumann, he named it entropy (information entropy), and the law itself was named information entropy (Shannon, 1948). At the same time, a similar law was formulated in non-equilibrium thermodynamics, which was named the Prigozhin-Glensdorff principle (Trokhimchuck, 2021). Later, Yu. Klimontovich built the theory of open systems on the basis of this principle (Trokhimchuck, 2021).

Further unification is associated with the use of L. de Broglie's formula from the thermodynamics of a point (de Broglie, 1964), which was interpreted as the principle of equality of ordered and disordered information for a closed system (Trokhimchuck, 2021). This made it possible to consider all the principles of deterministic and stochastic science from a single point of view (Trokhimchuck, 2021).

Also, on the basis of Rayleigh's principle of observability and the principle of uncertainty (Bohr, 1928), the theory of information-physical structures (Trokhimchuck, 1992) was built, which allowed a deeper understanding of the connection between theoretical physics and information theory.

On the basis of these studies, criteria were developed both for the construction of a more general theory of open systems and for the characterization of such phenomena as the vacuum (Trokhimchuck, 2021).

Physical constants play a significant role in the unification of physical laws (Barrow, 1986). Thus, the Newtonian gravitational constant is the legalization of the unification of celestial and terrestrial mechanics into a single system, and the speed of light is the unification of electricity, magnetism, and optics into Maxwellian electrodynamics.

The systems of Stoney constants (gravitational constant, speed of light in a vacuum, and electron charge) and Planck's constants (gravitational constant, speed of light in a vacuum, and Planck's constant) showed that it is possible to use dimensional analysis and an optimal set of constants to construct physical quantities that have a completely specific physical nature (plankion in modern cosmology) (Barrow, 1986).

Main results and discussions. It should be noted that besides the Newtonian synthesis program in physics there are some modifications (Trokhimchuck, 2021). In contrast to classical representations that exist in cybernetics and physics, the theory of information and physical structures is the synthesis of physical and information theory. The following problem is practically addressed: is it not possible to construct the theory so that it is based on both informational and physical laws and principles. Such a program was implemented in the theory of information and physical structures (Trokhimchuck, 1992), the main element of which is the Rayleigh ratio (Bohr, 1928). We give it in a one-dimensional form:

$$\Delta k_x \cdot \Delta x = \Delta k_y \cdot \Delta y = \Delta k_z \cdot \Delta z = \Delta\omega \cdot \Delta t = 1. \qquad (1)$$

Where Δk_x, Δx, Δk_y, Δy, Δk_z, Δz, $\Delta\omega, \cdot \Delta t$ – corresponding changes of wave numbers, coordinates, frequency and time.

When multiplying this relation by ħ (Planck (Dirac) constant) and changing the sign of equality to a sign greater than-equal, then we have (Bohr, 1928)

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = \Delta p_y \cdot \Delta y = \Delta p_z \cdot \Delta z = \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \,. \quad (2)$$

Where Δp_x, Δp_y, Δp_z – corresponding changes of liner momentum coordinates.

It is nothing more than a mathematical expression of the principle of complementarity and of the uncertainty principle.

But in quantum mechanics, ħ /2 is often written instead of ħ. This is due to the fact that "half" of uncertainty is attributed to incoherent processes. (the so-called zero states of the quantum vacuum).

If we put equal signs in formulas (1) and (2), we will get a mathematical expression of the conditions of classical and quantum coherence (Perina, 1985).

If we change the signs to differentials and use linear differential forms, we will get the theory of information-physical structures (Trokhimchuck, 1992).

Recall that the relation (1) is a condition of observation of a unit wave. In the theory of information-physical structures, it is considered as a quantum of change of dimensionless physical measure.

Thus, the relation (2), which is analogous to the Rayleigh ratio, can be regarded as a spatial-temporal representation of dimensionless entropy, as well as dimensionless action. They are equivalent to the de Broglie ratio (de Broglie, 1964)

$$\frac{S_a}{\hbar} = \frac{S_e}{k_B} = S_g \quad (3)$$

about the equality of ordered and disordered information in closed system. Here S_a is an action, S_e – entropy, $\hbar$ – Planck constant, k_B – Boltzmann constant (Trokhimchuck, 2021). Therefore, it makes sense to consider dimensionless relations not as elements of dimensionless entropy or action, but as elements of a generalized information (Trokhimchuck, 2021).

As shown in (Trokhimchuck, 2021), with this measure one can generalize the concept of physical vacuum. Indeed, in modern physics, this concept plays a very important role. There are three basic types of vacuum. This is Newtonian ether – a completely elastic environment in which all known physics interactions can be described and described; In electromagnetism (the quantum field theory also), this is a space-time continuum with $\varepsilon = 1$ and $\mu = 1$ (where ε, μ – the relative dielectric and magnetic permeability of the medium). W. Pauli (Trokhimchuck, 2021), by the way, considered an electromagnetic vacuum as a kind of ether. The third kind of vacuum is cosmological, which is main in cosmology.

In (Trokhimchuck, 2021), the view was expressed that an electromagnetic vacuum is mainly a dynamic environment, and Newtonian ether is static.

According to (Trokhimchuck, 2021), we introduce the concept of vacuum from a polymetric analysis.

Definition 1. A generalized vacuum is the state of a system in which the change of the generalized measure is zero.

Here are examples:

1. Ether of Newton – Mach. The reference system – the absolute and spatial-temporal measure is also absolute, so the change of this measure is zero.
2. Electromagnetic vacuum. Measure is the quantum of action Planck constant h, $\delta h = 0$.
3. The theory of informational-physical structures: the measure is or dimensionless entropy, or action, the vacuum states will be states with $\delta S_e = 0$ and $\delta S_a = 0$.

From the latter, the role of the principle of dynamic equilibrium is very clearly visible: it is the principle of equilibrium between physics and information. Entropic representations and the principle of dynamic equilibrium itself can be summarized as follows (for a generalized measure we denote S_g):

$$\delta S_g > 0;\ S_g > 0; \quad (4)$$

$$\delta S_g < 0;\ S_g < 0; \quad (5)$$

$$\delta S_g = 0;\ S_g = 0. \quad (6)$$

The relation (4) is nothing more than the action principle, the Carnot principle, the Prigogine-Glensdorff principle, the uncertainty principle, criterion of open systems [7, 8]. The relation (5) is a generalization of the negentropic principle of the theory of information, principles of classic and quantum coherence theories, etc. Expression (6) is the condition for the existence of vacuum: $\delta S_g = 0$ is relative, $S_g = 0$ is absolute.

It should be noted that the trends in the development of theoretical physics in XVII – XVIII centuries, in particular the principle of Fermat and Maupertuis, led to the creation of the foundations of the modern theory of systems by E. B. de Condillac (de Condillack, 2009).

Thus, in the theory of information-physical structures and in this section in terms of laws the most general unification was carried out.

Here are some thoughts on the relationship between physics and information theory. Consider a more detailed relationship $S_g = k{\cdot}x - \omega{\cdot}t$.

In fact, if $S_g > 0$, that is, $k{\cdot}x > \omega{\cdot}t$, then the structure changes, which means that over time the structural part of the measure increases, that is, it increases its entropy, action, etc. When $S_g < 0$, this means that the structural part of the measure of relatively intense (frequency-time) changes little, so physical processes pass at a different speed than information (Trokhimchuck, 2021).

As we see at the level of laws, physics and information theory are synthesized and thus, using the example of physics, they showed that any theory is also informative.

In contrast to classical representations that exist in cybernetics and physics, the theory of information and physical structures is the synthesis of physical and information theory. The following problem is practically addressed: is it not possible to construct the theory so that it is based on both informational and physical laws and principles. Such a program was implemented in the theory of information and physical structures (Trokhimchuck, 1992), the main element of which is the Rayleigh ratio. We give it in a one-dimensional form:

$$\Delta k{\cdot}\Delta x = \Delta\omega{\cdot}\Delta t = 1. \qquad (1a)$$

Analogously we receive one-dimensional variant of formula (2).

$$\Delta p_x{\cdot}\Delta x = \Delta E{\cdot}\Delta t \geq \hbar. \qquad (2a)$$

This is nothing more than a mathematical expression of Bohr's complementarity and the principle of uncertainty.

The main concepts of the theory of information-physical structures are:

1) the principle of fundamental harmonic equilibrium;

2) the equivalence of all canonical parameters: E – energy; p – linear momentum; k – wave number; x – coordinate; ω – frequency; t – time;

3) polymetry, that is, for each physical phenomenon corresponds to its own metric (symmetry, geometry, dimension, etc.).

Definition 1. Information-physical (dynamic) structures will be called mathematical structures (constructive), which are formed and changed under the influence of the change of any of the canonical parameters or group of parameters, or the type of functional dependence (communication) between them.

Definition 2. A dynamic structure with pure bonds is called a structure in which (Trokhimchuck, 1992)

$$k{\cdot}x = N_1,\ \omega{\cdot}t = N_2, \qquad (7)$$

where N_1, N_2 – numbers.

Principle of fundamental harmonic equilibrium: When in the information-physical structure with pure bonds the form of connections does not change (does not change its dimension), the structure is in a state of harmonic equilibrium.

Principle of dynamic equilibrium: A structure is called dynamically equilibrium if

$$k{\cdot}x - \omega{\cdot}t = 0 \qquad (8)$$

or

$$k{\cdot}x = \omega{\cdot}t. \qquad (9)$$

Roughly speaking, correlations (7) and (8) are expanded Rayleigh correlation (ratio).

Now we rewrite Rayleigh ratio (1 a) and (2 a):

$$\Delta k{\cdot}\Delta x = \Delta\omega{\cdot}\Delta t, \qquad (10)$$

$$\Delta p_x{\cdot}\Delta x = \Delta E{\cdot}\Delta t. \qquad (11)$$

We replace the operator Δ on a differentiatial d. If only the parameter under the differential does not go to zero, then this substitution is mathematically correct. In this case we have

$$dk{\cdot}dx = d\omega{\cdot}dt,\ dp_x{\cdot}\,d\,x = dE{\cdot}\,dt, \qquad (12)$$

or equivalent

$$\frac{dx}{dt} = \frac{d\omega}{dk} = const,\ \ \frac{dx}{dt} = \frac{dE}{dp_x} = const. \qquad (13)$$

Integrating (13), with $const = V$ (speed) we have

$$E = p_x V + C_1;\ x = Vt + C_2;\ \omega = kV + C_3; \qquad (14)$$

where C_1, C_2, C_3 – integration constants. Having put $C_1 = E_0$, $C_2 = x_0$, $C_2 = x_0$, $C_3 = \omega_0$, we have

$$E = p_x V + E_0;\ x = Vt + x_0;\ ;\ \omega = kV + \omega_0; \qquad (15)$$

that is nothing else than the law of conservation of energy, the law of inertia and the law of addition of frequencies, and also the law of constant interaction velocity in an isotropic medium (relation (13). In an electromagnetic environment, this will be the speed of light c. If in the first case, replace V on c, and E_0 on m_0c^2, where m_0 – the initial mass of the moving body, then we have

$$E = p_x V \pm m_0 c^2, \qquad (16)$$

that is, the law of conservation of energy in an isotropic electromagnetic environment.

Further, the expansion of the relation (8) is carried out through the harmonic potential (Trokhimchuck, 1992)

$$\varphi = \varphi_0 exp\left\{i\left(kx - \omega t\right)\right\}. \qquad (17)$$

As shown in (Trokhimchuck, 1992), is nothing more than a dimensionless entropy; for large values of parameters it becomes equal to Boltzmann or Shannon (in more detail it is disassembled in (Trokhimchuck, 1992) entropy, that is

$$S_e = kx - \omega t\,. \qquad (18)$$

We can change S_e on δS_e, then we have for $\delta S_e = kx - \omega t > 0$ the law of increasing the entropy, and for $\delta S_e = kx - \omega t < 0$ – the negentropic principle of information theory.

It should be noted that cybernetics is also a synthetic science [George, 1979], which, in addition to physics and information theory, includes a number of other sciences. In general, it should be an open system. Therefore, the theory of information-physical structures removes part of the problems in creating a more universal theory – polymetric analysis (a universal theory of analysis and synthesis of any knowledge system) (Trokhimchuck, 2021).

But $kx - \omega t$ and $px - Et$ is also a wave phase and entropy can be replaced by action. In particular, this was reflected in the construction of the Lagrangian formalism of quantum mechanics (Trokhimchuck, 2017).

As we see at the level of laws, physics and information theory are synthesized.

Conclusions:

1. The problem of unification physical laws is researched.
2. The influence of these studies on the further unification of the laws of physics and information theory is shown.
3. The theory of informational and physical structures is analyzed.
4. Questions about the perspectives for the development of this direction of research are discussed.

REFERENCES:

1. Barrow, J.D., & Tippler, F. (1986). The Anthropic Cosmological Principle. Oxford: University Press, 676 p.
2. Bohr, N. (1928). *The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic theory*. Nature, Supplement, Vol.121, pp.580–590.
3. De Broglie, L. (1964). Thermodynamics of isolated point (Hidden thermodynamics of particles). Paris: Gauthiers Villars, 104 p.
4. De Condillac, E.B. (2009). A treatise about systems. (Traite des systemes), New York: Kessinger Publishing, 127 p.
5. George, F.H. (1979). Philosophical foundations of cybernetics. Tunbridge Wells: Abacus Press, 157 p.
6. Perina, J. (1985). Coherence of light. Berlin: Springer Verlag, 1985. 350 p.
7. Shannon, C. (1948). *Mathematical Theory of Communications*, The Bell System Technical Journal, vol. 27, pp. 379–423, 623–656.
8. Trokhimchuck, P.P. (2017). Teoretychna fizyka [Theoretical Physics]. Lutsk: Vezha-Print, 260 p.
9. Trokhimchuck, P.P. (2021). Theories of Everything: Past, Present, Future. Saarbrukken: Lambert Academic Publishing, 260 p.
10. Trokhimchuck, P.P. (1992). Teoriia optymalnykh dynamichnykh (informatsiino-fizychnykh) struktur [Theory of optimal dynamic (information-physical) structures]. Reports of Ukrainian Academy of Science, № 1, pp.22–25 [in Ukrainian].

BIBLIOGRAPHY:

1. Barrow J. D., Tippler F. The Anthropic Cosmological Principle. Oxford: University Press, 1986, 676 p.
2. Bohr N. *The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic theory*.// Nature, Supplement, 1928,121: 580–590.
3. De Broglie L. Thermodynamique du point isolé (Thermodynamique cachée des particules). Paris: Gauthiers Villars, 1964, 104 p.
4. De Condillac E. B. Traite des systemes. New York: Kessinger Publishing, 2009, 127 p.
5. George F. H. Philosophical foundations of cybernetics. Tunbridge Wells: Abacus Press, 1979, 157 p.
6. Perina J. Coherence of light. Berlin: Springer Verlag, 1985. 350 p.
7. Shannon C. Mathematical Theory of Communications, The Bell System Technical Journal, 1948, 27: 379–423, 623–656.

8. Трохимчук П. П. Теоретична фізика. Луцьк: Вежа-Друк, 2017. 260 с.
9. Trokhimchuck P. P. Theories of Everything: Past, Present, Future. Saarbrukken: Lambert Academic Publishing, 2021. 260 p.
10. Трохимчук П. П. Теорія оптимальних динамічних (інформаційно-фізичних) структур. Доповіді Академії наук України, 1992, № 1: 22–25.

УДК 004.94, 517.9
DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-10

Дмитро ШВАЛІКОВСЬКИЙ
інженер кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0009-0009-8860-0329*

Павло ШИГОРІН
доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А. В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-2396-8041*

Бібліографічний опис статті: Шваліковський, Д., Шигорін, П. (2024). Числовий розрахунок задачі плеяд у середовищі CAS Maxima. *Фізика та освітні технології*, 1, 80–86, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-10

ЧИСЛОВИЙ РОЗРАХУНОК ЗАДАЧІ ПЛЕЯД У СЕРЕДОВИЩІ CAS MAXIMA

Модельні задачі небесної механіки описуються за допомогою диференціальних рівнянь або їх систем. Добре відомо, що задача багатьох тіл в аналітичному вигляді є нерозв'язною, тому для симуляції руху зірок або їх скупчень необхідно послуговуватись числовими методами. Для гравітаційно зв'язаних об'єктів виникають завдання, що складно моделюються навіть за допомогою комп'ютера, оскільки часто розглядувана модель є жорсткою, тобто є значна залежність еволюції розв'язку від початкових умов. В роботі запропонована схема розрахунку задачі семи тіл зоряного кластеру Плеяд. Розрахунки провадяться у відкритій системі комп'ютерної алгебри Maxima, котра надає всі необхідні інструменти як для безпосередніх обчислень, так і для візуалізації отриманих результатів. Використано метод розв'язання диференціальних рівнянь Рунге-Кутта-Фельберга 5-го порядку, побудовані графіки зоряних траєкторій та залежності їх видимих координат на небесній сфері від часу.

Ключові слова: *CAS Maxima, чисельний розрахунок, метод Рунге-Кутта-Фельберга, зоряні скупчення, Плеяди.*

Dmytro SHVALIKOVSKYI
Engineer of the Computing Physics Laboratory at the Department of Theoretical and Computing Physics of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0009-0009-8860-0329*

Pavlo SHYGORIN
Associate Professor at the Department of Theoretical and Computing Physics of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025
ORCID ID: *https://orcid.org/0000-0003-2396-8041*

To cite this article: Shvalikovskyi, D., Shygorin, P. (2024). Chyslovyi rozrakhunok zadachi pleiad v seredovyshchi CAS Maxima [Numerical calculation of the Pleiades problem in CAS Maxima Environment]. *Physics and Educational Technology*, 1, 80–86, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-10

NUMERICAL CALCULATION OF THE PLEIADES PROBLEM IN CAS MAXIMA ENVIRONMENT

Model problems of celestial mechanics are described by means of differential equations or their systems. It is well known that the many-body problem is intractable in an analytical form, so numerical methods must be used to simulate the motion of stars or their clusters. For gravitationally bound objects, problems arise that are difficult to model even with a computer, since the model under consideration is often rigid, i.e., there is a significant dependence of the solution evolution on the initial conditions. This paper proposes a scheme for solving the seven-body problem of the Pleiades star cluster. The calculations are carried out in the open system of computer algebra Maxima, which provides all the necessary

tools for both direct calculations and visualization of the results. The method of solving the Runge-Kutta-Felberg differential equations of the 5th order is used, and graphs of stellar trajectories and the dependence of their apparent coordinates on the celestial sphere on time are plotted.

Key words: *CAS Maxima, numerical calculation, Runge-Kutta-Fehlberg method, star clusters, Pleiades.*

Вступні зауваги. Зоряний кластер Плеяд (українська назва Стожари) має діаметр в 12 світлових років. Від нас Плеяди віддалені на відстань в 410 світлових років, вони вважаються порівняно молодим скупченням зірок, вік яких знаходиться в діапазоні 75-100 мільйонів років. Плеяди давно відомі як фізично пов'язана група об'єктів, а не результат випадкової проєкції різновіддалених зір. Велику цікавість цей кластер викликає в першу чергу тим, що він є другим після групи Ґіад найближчим до Землі зірковим скупченням. Плеяди та Ґіади є ідеальним ґрунтом для моделювання еволюції зір, оскільки всі їхні зірки мають однаковий вік і склад, але демонструють широкий діапазон мас [1, 2]. Ці два скупчення єдині, відстань до яких можна виміряти на поверхні Землі безпосередньо за їхнім паралактичним зміщенням. Виміряні значення лежать в основі діаграми Герцшпрунга – Рассела, за якою визначають відстані до всіх інших зоряних скупчень. Науковці екстраполюють отриману шкалу від розсіяних зіркових скупчень до галактик і галактичних скупчень, побудувавши шкалу космічних відстаней [4]. Зрештою, знання астрономів про вік і розвиток Всесвіту у великій мірі залежать від знання відстані до зіркового скупчення Плеяд, тому вони є своєрідним еталоном, котрий добре вивчений та змодельований (рис. 1) [7].

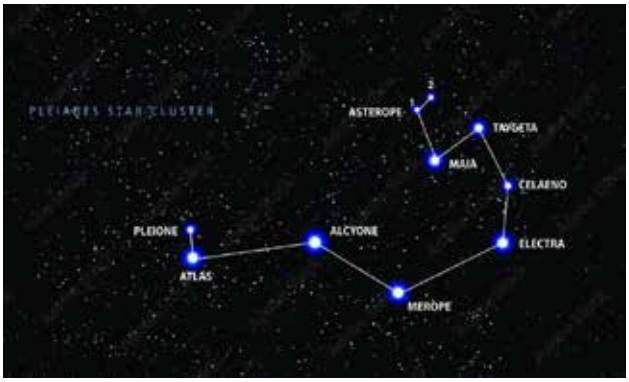


Рис. 1. Сузір'я Плеяд

Для моделювання задачі використаємо програмний пакет CAS Maxima, який є найбільш розробленим вільним аналогом відомих математичних застосунків Maple чи Mathematica, та у певних класах розрахунків ні в чому їм не поступається [6]. Цей пакет може успішно використовуватись для розв'язання цілої низки проблем математичного аналізу, лінійної алгебри, чисельного та візуального моделювання. Переваги його наступні: можливість вільного використання (Maxima відноситься до класу вільних програм та поширюється на основі ліцензії GNU); можливість функціонування під управлінням різних ОС (зокрема Linux та Windows); невеликий розмір програми; має зручний та інтуїтивно зрозумілий інтерфейс.

Постановка проблеми та аналіз досліджень. Задача Плеяд – це модельна задача небесної механіки семи зірок, що рухаються в одній площині. Математично вона описується системою з 14 диференціальних рівнянь другого порядку разом з 28 початковими умовами, що визначають початкове положення та швидкість для кожного небесного тіла. Задача не жорстка, але досить складна, її можна легко розширити на будь-яку кількість об'єктів, не обов'язково в одній площині. Звісно, реальний рух зірок відбувається у тривимірному просторі, але нас в першу чергу цікавитиме проєкція цього руху на площину небесної сфери.

Нехай маємо рух кількох масивних тіл на площині. Запишемо другий закон Ньютона для i-го тіла та вираз для сили притягання між двома тілами i та j, що взаємодіють гравітаційно:

$$\vec{F}_i = \frac{d\vec{p}_i}{dt} = m_i \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2}; \quad \vec{F}_{ij} = G\frac{m_i m_j}{\left|\vec{r}_j - \vec{r}_i\right|^3}\left(\vec{r}_j - \vec{r}_i\right).$$

У системі багатьох тіл сила, що діє на окремий об'єкт, є векторною сумою всіх сил, що діють на нього від усіх інших об'єктів. Тому можемо записати $\vec{F}_i = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}$, що після покладання $G = 1$ та розділення змінних нам дає

$$\begin{cases} \ddot{x}_i = \sum\limits_{i \neq j} \dfrac{m_j\left(x_j - x_i\right)}{\left(\left(x_i - x_j\right)^2 + \left(y_i - y_j\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}}; \\ \ddot{y}_i = \sum\limits_{i \neq j} \dfrac{m_j\left(y_j - y_i\right)}{\left(\left(x_i - x_j\right)^2 + \left(y_i - y_j\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}}. \end{cases}$$

Початкові дані для цього руху беруться із роботи [3]. Числа означають положення кожного тіла відносно певної умовної нерухомої точки всередині скупчення (у світлових роках) та їх швидкості в момент часу $t=0$. Маси розглядуваних зірок є фактично однаковими, вони міняються від 3 до 6 мас Сонця. Ми покладемо масу кожної зірки рівною її номеру $m_j = j$, на вигляд розв'язку це вплине мінімально.

$$\begin{cases} x_i\big|_{t=0} = [3,3,-1,-3,2,-2,2]^T; \\ y_i\big|_{t=0} = [3,-3,2,0,0,-4,4]^T; \\ \dot{x}_i\big|_{t=0} = [0,0,0,0,0,1.75,-1.5]^T; \\ \dot{y}_i\big|_{t=0} = [0,0,0,-1.25,1,0,0]^T. \end{cases}$$

Щоб перейти від 14 рівнянь другого порядку до системи з 28 рівнянь першого порядку, запишемо їх у наступній формі [5]:

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w \\ f(z) \end{pmatrix},$$

де z позначає набір всіх координат x_i та y_i, $f(z)$ позначає набір правих частин рівнянь для $\ddot{x}_i$ та $\ddot{y}_i$, w проміжна змінна, яка є відповідною проєкцією лінійної швидкості кожного об'єкту.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів. Переведемо ці вхідні дані на мову Maxima та побудуємо розв'язки. Задаємо вирази для гравітаційних рівнянь руху (команда concat з'єднує будь-які списки чи символи в один):

```
(%i1) fx(i):=sum(if i#j then j·(concat(x,j)-concat(x,i)) /
                              ((concat(x,i)-concat(x,j))^2+
                               (concat(y,i)-concat(y,j))^2)^1.5
                 else 0 ,j,1,7);
```

$$(\%o1)\ \mathrm{fx}(i) := \sum_{j=1}^{7} \text{if } i\#j \text{ then } \frac{j\,(\mathrm{concat}(x,j)-\mathrm{concat}(x,i))}{\left((\mathrm{concat}(x,i)-\mathrm{concat}(x,j))^2+(\mathrm{concat}(y,i)-\mathrm{concat}(y,j))^2\right)^{1.5}} \text{ else } 0$$

```
(%i2) fy(i):=sum(if i#j then j·(concat(y,j)-concat(y,i)) /
                              ((concat(x,i)-concat(x,j))^2+
                               (concat(y,i)-concat(y,j))^2)^1.5
                 else 0 ,j,1,7);
```

$$(\%o2)\ \mathrm{fy}(i) := \sum_{j=1}^{7} \text{if } i\#j \text{ then } \frac{j\,(\mathrm{concat}(y,j)-\mathrm{concat}(y,i))}{\left((\mathrm{concat}(x,i)-\mathrm{concat}(x,j))^2+(\mathrm{concat}(y,i)-\mathrm{concat}(y,j))^2\right)^{1.5}} \text{ else } 0$$

Формуємо список з 28 правих частин рівнянь руху, запровадивши додаткові змінні w_x, w_y (команда flatten робить із списків різних рівнів вкладеності один великий список першого рівня, де перелічені всі елементи):

```
(%i3) equs:flatten([makelist(concat(wx,i),i,1,7),
                    makelist(concat(wy,i),i,1,7),
                    makelist(fx(i),i,1,7),
                    makelist(fy(i),i,1,7)])$
```

Формуємо список із 28 невідомих функцій, відносно яких потрібно розв'язати рівняння руху:

```
(%i4) funcs:flatten([makelist(concat(x,i),i,1,7),
                     makelist(concat(y,i),i,1,7),
                     makelist(concat(wx,i),i,1,7),
                     makelist(concat(wy,i),i,1,7)]);
(%o4) [x1,x2,x3,x4,x5,x6,x7,y1,y2,y3,y4,y5,y6,y7,wx1,wx2,wx3,wx4,wx5,wx6,wx7,wy1,wy2
,wy3,wy4,wy5,wy6,wy7]
```

Можна помітити, що завершення команди значком «$» не виводить результату здійснення операції на екран, тоді як значок «;» задає виведення вихідної лінії для перегляду. Вибір кінцевого значка залежить лише від вподобань програміста, та побіжної перевірки того, чи всі команди вдало записались. Відображені результати обчислень можуть бути досить об'ємними, наприклад задана команда (%i3) продукує кілька сторінок тексту.

Тепер задаємо початкові умови у момент часу $t=0$ та проміжок інтегрування, оберемо його рівним $t\in[0;3]$, де одиниця часу рівна 100 тис. років.

```
(%i5) init:[3,3,-1,-3,2,-2,2,3,-3,2,0,0,-4,4,0,0,0,0,0,1.75,-1.5,0,0,0,-1.25,1,0,0];
(%o5) [3,3,-1,-3,2,-2,2,3,-3,2,0,0,-4,4,0,0,0,0,0,1.75,-1.5,0,0,0,-1.25,1,0,0]
```

```
(%i7) t_start:0; t_end:3;
(%o6) 0
(%o7) 3
```

Пакет Maxima має кілька вбудованих команд для чисельного інтегрування диференціальних рівнянь. Крім того, цілком можливо написати свою власну команду, яка буде інтегрувати ЗДР з будь-якою наперед заданою точністю (вона буде обмежуватись лише технічними характеристиками комп'ютера та вільним часом дослідника, який хоче дочекатись результатів). Існує стандартна функція rk:

rk(deqn,y,y0,[x,x0,x1,h]),

що реалізує метод Рунге-Кутта 4-го порядку. Тут deqn – диференціальне рівняння, y – залежна змінна, y0 – початкове значення у точці x0, [x,x0,x1,h] – незалежна змінна, початкова, кінцева точки та крок інтегрування. Цей метод фактично повсюдно використовується і вважається досить надійним для задач, що не містять порогових ефектів (threshold effects) або жорстких умов (stiff problems).

Існує, однак, більш вдала реалізація цього методу, що носить назву метод Рунге-Кутта-Фельберга 4-5 порядку. Особливість його полягає в тому, що розбиття проміжку інтегрування на малі частини залежить не від заздалегідь заданого кроку по осі x, а від величини зміщення обчисленої інтегральної кривої по осі y. Якщо ця величина при деяких x_i буде перевищувати певне вказане значення (за замовчуванням 10^{-6}), система повернеться назад, збільшить кількість кроків розбиття та проведе перерахунок, тим самим підвищивши порядок точності інтегрування від 4 до 5. Тому цей метод використовують при вказаних вище проблемних ситуаціях.

Метод Рунге-Кутта-Фельберга 4-5 порядку реалізує команда rkf45. Цей спосіб застосовний лише до ЗДР першого порядку, що і зумовило введення нами проміжної змінної w. Розглянемо докладно синтаксис та застосування команди.

Для побудови чисельного розв'язку диференціального рівняння воно має бути записане у вигляді $y'(x)=f(x,y)$, у випадку автономної системи – має бути у вигляді $\{\dot{x}=G(x,y);\dot{y}=H(x,y)\}$. Синтаксис наступний:

rkf45(f(x,y),y,y0,[x,x0,x1],opts) – для одиночного рівняння;

rkf45([G(x,y),H(x,y)],[x,y],[x0,y0],[t,t0,t1], opts) – для системи рівнянь.

Тут f, G, H – права частина ЗДР або їх список, y або [x,y] – залежна змінна або їх список, y0 або [x0,y0] – початкові значення залежної змінної, [x,x0,x1] або [t,t0,t1] – оголошення незалежної змінної, її початкове та кінцеве значення, opts – додаткові опції.

Завантажуємо пакет rkf45 та застосовуємо його:

```
(%i8) load(rkf45);
(%o8) C:/Maxima-gcl-5.37.3/share/maxima/5.37.3/share/contrib/rkf45/rkf45.mac
```

```
(%i9) sol1:rkf45(equs,funcs,init,[t,t_start,t_end],report=true)$
-----------------------------------------------------
Info: rkf45:
   Integration points selected: 1143
    Total number of iterations: 1144
           Bad steps corrected: 2
       Minimum estimated error: 3.896190579368019 10^-8
       Maximum estimated error: 9.82861310778899 10^-7
Minimum integration step taken: 2.515209236707204 10^-5
Maximum integration step taken: 0.0650739568467315
-----------------------------------------------------
```

Із відгуку системи дізнаємось, що було обрано 1143 точки інтегрування, з максимальною похибкою $\sim 10^{-6}$ на будь-якому кроці. Результати повернулись у вигляді списку із 1143 елементів, кожен з яких є списком із 29 елементів (час t, сім просторових координат x_i, сім просторових координат y_i, сім x-компонент швидкості w_{xi}, сім y-компонент швидкості w_{yi}). Для опрацювання даних виділимо окремо списки для часу та всіх просторових координат.

```
(%i10) t_list:makelist(sol1[k][1],k,1,length(sol1))$
```

```
(%i17) x1_list:makelist(sol1[k][2],k,1,length(sol1))$
       x2_list:makelist(sol1[k][3],k,1,length(sol1))$
       x3_list:makelist(sol1[k][4],k,1,length(sol1))$
       x4_list:makelist(sol1[k][5],k,1,length(sol1))$
       x5_list:makelist(sol1[k][6],k,1,length(sol1))$
       x6_list:makelist(sol1[k][7],k,1,length(sol1))$
       x7_list:makelist(sol1[k][8],k,1,length(sol1))$
```

```
(%i24) y1_list:makelist(sol1[k][9],k,1,length(sol1))$
       y2_list:makelist(sol1[k][10],k,1,length(sol1))$
       y3_list:makelist(sol1[k][11],k,1,length(sol1))$
       y4_list:makelist(sol1[k][12],k,1,length(sol1))$
       y5_list:makelist(sol1[k][13],k,1,length(sol1))$
       y6_list:makelist(sol1[k][14],k,1,length(sol1))$
       y7_list:makelist(sol1[k][15],k,1,length(sol1))$
```

Позначимо окремо початкові точки, з яких стартував рух кожної зірки:

```
(%i25) init_pnts:[discrete,makelist([init[i],init[i+7]],i,1,7)];
(%o25) [discrete,[[3,3],[3,-3],[-1,2],[-3,0],[2,0],[-2,-4],[2,4]]]
```

Тепер можемо зобразити траєкторії руху кожної зорі (рис. 2 a). Як бачимо, на графіку присутня область, на якій траєкторії дуже переплітаються. Клацнувши правою кнопкою миші на відповідній частині малюнка, можна виділити цю область, і тоді вона автоматично збільшиться (рис. 2 b).

```
(%i26) plot2d([init_pnts,[discrete,x1_list,y1_list],[discrete,x2_list,y2_list],
          [discrete,x3_list,y3_list],[discrete,x4_list,y4_list],
          [discrete,x5_list,y5_list],[discrete,x6_list,y6_list],
          [discrete,x7_list,y7_list]],  [x,-4,4],[y,-6,6],
          [style,[points,2,5,7],[lines,2,1],[lines,2,2],
          [lines,2,3],[lines,2,4],[lines,2,5],[lines,2,6],[lines,2,2]],
          [legend,"Стартові точки","Зоря 1","Зоря 2","Зоря 3","Зоря 4","Зоря 5","Зоря 6","Зоря 7"]
            );
(%o26) [C:/Users/orreginal-pc/maxout.gnuplot]
```

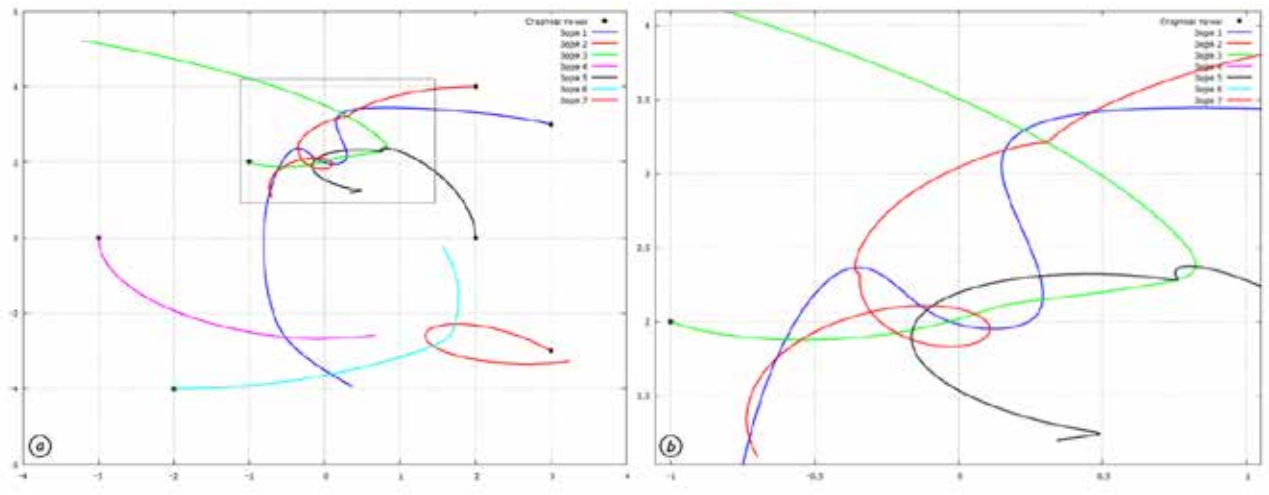


Рис. 2. Траєкторії окремих зір зоряного скупчення Плеяд (a), збільшена частина області з переплетеними траєкторіями (b)

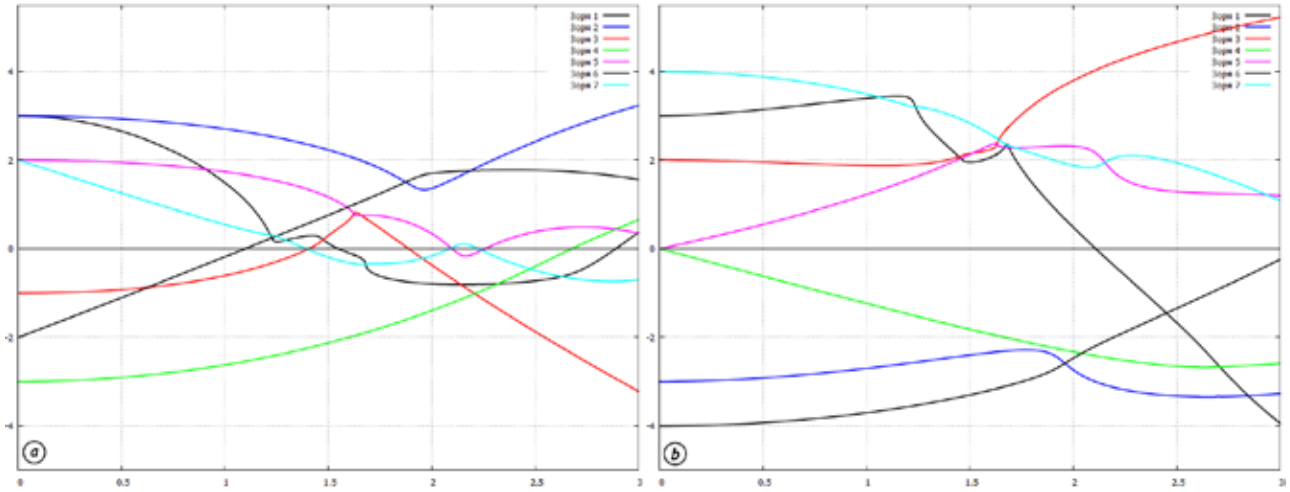


Рис. 3. Зміна з часом координат $x(t)$ (a) та $y(t)$ (b)

Задавши подібну команду plot2d, де у парах замість x чи y стоять значення часових точок, можна зобразити часову еволюцію відповідних просторових компонент $x(t)$, $y(t)$ (рис. 3).

Використавши додаткову опцію absolute_tolerance, можна змінювати величину похибки та підвищувати точність інтегрування, однак платою за це буде значно більше навантаження на процесор та збільшення часу обчислень. Наприклад, точність 10^{-10} замість 10^{-6} призведе до того, що час обробки зміниться від 5 с до 10 год. Втім, задачу чисельного інтегрування руху кількох тіл для реальних потреб космічних розрахунків обчислюють з точністю 10^{-16}, що для звичайних комп'ютерів вимагало б років безперервної роботи.

Висновки. За допомогою пакету математичних розрахунків CAS Maxima було чисельно проінтегровано задачу семи тіл у небесній механіці, побудовані точки розв'язків та відповідні траєкторії руху зір у зоряному скупченні Плеяд. Отримані дані моделювання узгоджуються з експериментальними фактами та попередньо зробленими розрахунками. Продемонстровано, що розроблений підхід є гнучким та легко масштабується, у ньому можна керувати точністю обчислень та застосовувати до іншого числа небесних тіл.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Dennis Stello, Poul Erik Nissen. The problem of the Pleiades distance. Constraints from Stromgren photometry of nearby field stars. arXiv:astro-ph/0105222v1.
2. Guillermo Abramson. Around the Pleiades. Centro Atómico Bariloche, CONICET and Instituto Balseiro. URL: https://www.arxiv-vanity.com/papers/1808.02968/.
3. Francesca Mazzia and Felice Iavernaro. The Set for Initial Value Problem Solvers. Department of Mathematics University of Bari. Report 40, 2003.
4. J. Kelly Beatty. Resolving the Pleiades Distance Problem. Sky & Telescope. August 28, 2014.
5. MathWorks Help Center. Solve Celestial Mechanics Problem with High-Order Solvers. URL: https://de.mathworks.com/help/matlab/math/solve-celestial-mechanics-problem-with-high-order-ode-solvers.html.
6. Шваліковський Д. М. CAS Maxima: основи роботи. Луцьк: Вежа-Друк, 2022. 106 с.
7. Шигорін П. П. Вибрані питання астрономії та астрофізики: Навчальний посібник. Луцьк, 2020. 136 с.

REFERENCES:

1. Dennis Stello, Poul Erik Nissen. The problem of the Pleiades distance. Constraints from Stromgren photometry of nearby field stars. arXiv:astro-ph/0105222v1.
2. Guillermo Abramson. Around the Pleiades. Centro Atómico Bariloche, CONICET and Instituto Balseiro. Retrieved from https://www.arxiv-vanity.com/papers/1808.02968/.
3. Francesca Mazzia and Felice Iavernaro. (2003). The Set for Initial Value Problem Solvers. Department of Mathematics University of Bari. Report 40.
4. J. Kelly Beatty. (2014).Resolving the Pleiades Distance Problem. Sky & Telescope. August 28.
5. MathWorks Help Center. Solve Celestial Mechanics Problem with High-Order Solvers. Retrieved from https://de.mathworks.com/help/matlab/math/solve-celestial-mechanics-problem-with-high-order-ode-solvers.html.
6. Shvalikovskyi, D. M. (2022). CAS Maxima: osnovy roboty [CAS Maxima: the Basics]. Lutsk: Vezha-Print, 106 p [in Ukrainian].
7. Shygorin, P. P. (2020). Vybrani pytannia astronomii ta astrofizyky: Navchalnyi posibnyk [Selected Issues of Astronomy and Astrophysics: a Study Guide]. Lutsk, 136 p [in Ukrainian].

ЗМІСТ

Василь ВЕЛИЧКО, Ніна ГОЛОВІНА, Оксана ОСТРЕЙ, Наталія ПОЛІЩУК
ВИВЧЕННЯ ФІЗИЧНИХ ПРИНЦИПІВ ВІЙСЬКОВИХ ДІЙ ЯК ЗАСІБ ФОРМУВАННЯ ЗДОРОВ'ЯЗБЕРІГАЮЧОЇ КОМПЕТЕНТНОСТІ..... 3

Оксана ЗАМУРУЄВА, Василь САХНЮК, Юрій ІВАНОВСЬКИЙ, Андрій ФЛЯК
ВЛАСТИВОСТІ ПЕРСПЕКТИВНИХ КОМПОЗИТІВ ДЛЯ ОПТОЕЛЕКТРОННОЇ ТЕХНІКИ.....17

Андрій КЕВШИН, Тетяна ЯЦИНЮК, Володимир ГАЛЯН, Ганна ШАВАРОВА, Віталій АРТЮХ
ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ХАЛЬКОГЕНІДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ (ОГЛЯД).....25

Галина МИРОНЧУК, Ніна ГОЛОВІНА, Андрій КЕВШИН
ПАМ'ЯТІ ГЕОРГІЯ ЄВЛАМПІЙОВИЧА ДАВИДЮКА.....31

Мирон РУДИШ, Галина МИРОНЧУК, Міхал ПЯСЕЦЬКИЙ, Роман МАТВІЇВ, Денис МИРОНЧУК
ЕЛЕКТРОННА БУДОВА І ОПТИЧНІ СПЕКТРИ КРИСТАЛА Ag_3SbS_3 У МОНОКЛІННІЙ ФАЗІ.....37

Мирон РУДИШ, Міхал ПЯСЕЦЬКИЙ, Андрій КАШУБА, Владислав КАРНАУШЕНКО
ПЕРШОПРИНЦИПНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ БУДОВИ КРИСТАЛА $TlSbSe_2$..... 48

Микола САДОВИЙ, Олена ТРИФОНОВА
ОСОБЛИВОСТІ МЕТОДИКИ ФОРМУВАННЯ ВІРТУАЛЬНИХ ДОСЛІДІВ ІЗ НАВЧАННЯ РОЗПОДІЛУ МОЛЕКУЛ ЗА ШВИДКОСТЯМИ..... 57

Petro TROKHIMCHUCK, Oleh VILIHURSKYI, Oksana ZAMURUIEVA, Pavlo SAKHNYUK, Andrew IVANOVSYI
MAIN PROBLEMS OF DEVELOPMENT THE COMPUTER SCIENCE AND NECESSITY OF THE APPLICATION OF PHYSICAL PROCESSES.....63

Petro TROKHIMCHUCK
TO QUESTION ABOUT UNIFICATION THE BASIC LAWS OF PHYSICS AND INFORMATION THEORY 74

Дмитро ШВАЛІКОВСЬКИЙ, Павло ШИГОРІН
ЧИСЛОВИЙ РОЗРАХУНОК ЗАДАЧІ ПЛЕЯД У СЕРЕДОВИЩІ CAS MAXIMA 80

CONTENTS

Vasyl VELYCHKO, Nina HOLOVINA, Oksana OSTREI, Natalia POLISHCHUK
STUDY OF THE PHYSICAL PRINCIPLES OF MILITARY ACTIONS
AS A MEANS OF FORMING HEALTH-PRESERVING COMPETENCE..... 3

Oksana ZAMURUIEVA, Vasily SAKHNYUK, Yurii IVANOVSYI, Andrew FLIAK
PROPERTIES OF PROMISING PROSPECTIVE COMPOSITES FOR OPTOELECTRONIC.....17

Andrii KEVSHYN, Tetiana YATSYNIUK, Volodymyr HALYAN, Hanna SHAVAROVA, Vitaly ARTYUKH
THE MAIN CHARACTERISTIC OF CHALCOGENIDE CONDUCTORS
AND THEIR APPLICATIONS (REVIEW).....25

Galyna MYRONCHUK, Nina HOLOVINA, Andriy KEVSHYN
IN MEMORY OF GEORGY YEVLAMPIYOVYCH DAVYDIUK.....31

Myron RUDYSH, Galyna MYRONCHUK, Michał PIASECKI, Roman MATVIIV, Denis MYRONCHUK
ELECTRONIC STRUCTURE AND OPTICAL SPECTRA OF Ag_3SbS_3 CRYSTAL
IN THE MONOCLINIC PHASE.....37

Myron RUDYSH, Michał PIASECKI, Andrii KASHUBA, Vladyslav KARNAUSHENKO
AB-INITIO STUDIES OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE $TlSbSe_2$ CRYSTAL.....48

Mykola SADOVYI, Olena TRYFONOVA
PECULIARITIES OF THE METHOD OF FORMING VIRTUAL EXPERIMENTS
ON LEARNING THE DISTRIBUTION OF MOLECULES BY VELOCITIES.....57

Petro TROKHIMCHUCK, Oleh VILIHURSKYI, Oksana ZAMURUIEVA, Pavlo SAKHNYUK, Andrew IVANOVSYI
MAIN PROBLEMS OF DEVELOPMENT THE COMPUTER SCIENCE AND NECESSITY
OF THE APPLICATION OF PHYSICAL PROCESSES.....63

Petro TROKHIMCHUCK
TO QUESTION ABOUT UNIFICATION THE BASIC LAWS OF PHYSICS
AND INFORMATION THEORY 74

Dmytro SHVALIKOVSKYI, Pavlo SHYGORIN
NUMERICAL CALCULATION OF THE PLEIADES PROBLEM
IN CAS MAXIMA ENVIRONMENT.....80

НОТАТКИ

ФІЗИКА ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Випуск 1

Коректура • Ірина Миколаївна Чудеснова

Комп’ютерна верстка • Андрій Олександрович Філатов

Формат 60x84/8. Гарнітура Times New Roman. Підписано до друку: 03.06.2024.
Папір офсет. Цифровий друк. Ум. друк. арк. 10,46. Замов. № 0624/468. Наклад 300 прим.

Видавництво і друкарня – Видавничий дім «Гельветика»
65101, Україна, м. Одеса, вул. Інглезі, 6/1
Телефон +38 (095) 934 48 28, +38 (097) 723 06 08
E-mail: mailbox@helvetica.ua
Свідоцтво суб’єкта видавничої справи
ДК № 7623 від 22.06.2022 р.