

Волинський національний університет
імені Лесі Українки

ФІЗИКА ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Випуск 2



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;

Трифорова Олена Михайлівна – доктор педагогічних наук, 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.С. 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 жовтня 2024 р., протокол № 15

Науковий журнал «Фізика та освітні технології»
zareєстровано 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 373.3/.5.016:53]:004.9

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-1>

Василь ВЕЛИЧКО

здобувач освіти 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 відділу технічних засобів навчання «Центру інноваційних технологій та комп'ютерного тестування», Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1174-8367>

Бібліографічний опис статті: Величко, В., Головіна, Н., Острей, О. (2024). Задачі на військову тематику, що розкривають суть фізичних основ функціонування радіоелектронної боротьби. *Фізика та освітні технології*, 2, 3–11, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-1>

ЗАДАЧІ НА ВІЙСЬКОВУ ТЕМАТИКУ, ЩО РОЗКРИВАЮТЬ СУТЬ ФІЗИЧНИХ ОСНОВ ФУНКЦІОНУВАННЯ РАДІОЕЛЕКТРОННОЇ БОРОТЬБИ

Десятилітня агресія РФ проти України є рушієм змін життя українського суспільства в цілому, і освіти зокрема. Розуміння фізичних основ сучасного озброєння, виступає не тільки засобом первинної військової підготовки молоді, а й сприяє формуванню здоров'язберігаючої компетенції. Тому актуальним є розгляд інтеграції військової тематики у шкільний курс фізики. Сучасні бойові дії називають війною дронів, отож вивчення фізичних основ засобів протидії безпілотним літаючим апаратам, а саме засобів радіоелектронної боротьби (РЕБ) є ключем до перемог. У роботі проаналізовано сучасний стан досліджень щодо використання військової тематики на уроках фізики та запропоновано методичні рекомендації для введення елементів РЕБ у навчальний процес. Обґрунтовано необхідність такого інтегрування, посилаючись на актуальність теми у контексті сучасних військових конфліктів та державну політику України щодо військово-патріотичного виховання молоді. Проаналізовано державний стандарт базової середньої освіти та чинні навчальні програми з фізики, визначено відповідні розділи, де доцільно розглядати питання РЕБ. Представлено огляд фізичних принципів, що лежать в основі функціонування засобів РЕБ, таких як радіолокація, радіозв'язок, електромагнітні перешкоди. Запропоновано ряд задач практичного змісту на військову тематику для 9-11 класів, які можуть бути використані на уроках фізики для ілюстрації теоретичного матеріалу. Умови задач складено з використанням тактико-технічних характеристик засобів радіоелектронної боротьби ворога, які систематизовані авторами у відповідну таблицю. Кожна задача містить детальний розбір фізичної ситуації та розв'язок. Вказано місце розгляду цих задач у конкретній з базових тем. Автори підкреслюють, що вивчення фізичних основ РЕБ не лише сприяє поглибленню знань учнів з фізики, але й формує в них системне мислення, розвиває вміння аналізувати реальні фізичні процеси та застосовувати отримані знання для розв'язання практичних задач.

Ключові слова: радіоелектронна боротьба, фізичні задачі практичного змісту, військова тематика.

Vasyl VELYCHKO

Student at 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 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/0000-0002-1152-1536>

Oksana OSTREI

Computer systems engineer at the Technical Teaching Aids Department at 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>

To cite this article: Velychko, V., Holovina, N., Ostrei, O. (2024). Zadachi na viiskovu tematyku, shcho rozkryvaiut sut fizychnykh osnov funktsionuvannia radioelektronnoi borotby [Military-themed problems revealing the physical foundations of electronic warfare operations]. *Physics and Educational Technology*, 2, 3–11, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-1>

MILITARY-THEMED PROBLEMS REVEALING THE PHYSICAL FOUNDATIONS OF ELECTRONIC WARFARE OPERATIONS

The decade-long Russian aggression against Ukraine is the driver of changes in the life of Ukrainian society in general, and education in particular. Understanding the physical principles of modern weapons not only serves as a means of initial military training for young people but also contributes to the formation of health-preserving competence. Therefore, it is relevant to consider the integration of military topics into the school physics course. Modern warfare is called drone warfare, so learning the physical basics of countering unmanned aerial vehicles, namely electronic warfare (EW) is the key to victory. This paper analyzes the current state of research on the use of military themes in physics lessons and proposes methodological recommendations for introducing EW elements into the educational process. The need for such integration is justified by the relevance of the topic in the context of modern military conflicts and Ukraine's state policy on military-patriotic education of youth. The state standard of basic secondary education and current curricula in physics have been analyzed, and the relevant sections where it is appropriate to consider the issue of EW were determined. An overview of the physical principles underlying the operation of EW means such as radar, radio communication, and electromagnetic interference is presented. A number of problems of practical content on military topics for grades 9-11 are proposed, which can be used in physics lessons to illustrate theoretical material. The problem conditions are compiled using the tactical and technical characteristics of the enemy's EW means, which are systematized by the authors in a corresponding table. Each problem contains a detailed analysis of the physical situation and solution. The authors emphasize that studying the physical foundations of EW not only contributes to deepening students' knowledge of physics but also forms their systematic thinking, develops their ability to analyze real physical processes, and apply the acquired knowledge to solve practical problems.

Key words: *electronic warfare, practical physical problems, military theme.*

Вступ. Постановка проблеми. Використання інформаційних технологій у військовій сфері є основою безпеки кожної держави сучасності (Alberts, Papp, 1997, 2002, 2001). Військові конфлікти сьогодення відрізняються використанням безпілотних роботизованих засобів ведення військових дій, управління якими відбувається через фізичне середовище роботи інформаційно-комунікаційних технологій (ІКТ) – електричне поле, що виступає

передавальним середовищем у бездротових технологіях передачі сигналу. Для протидії цим засобам використовується радіоелектронна боротьба (РЕБ) – це військові дії, у ході яких використовуються електромагнітна енергія для забезпечення обізнаності про ситуацію та створення наступальних і оборонних ефектів. Тому вивчення фізичних основ РЕБ є вкрай актуальним для молоді, яка становитиме основний людський потенціал обороноздатності держави

і, в майбутньому, може обрати саме цей напрям для своєї професійної діяльності.

У 2018 році було проведено міжнародне дослідження якості освіти PISA в Україні та зафіксовано істотний розрив між теоретичними знаннями здобутими учнями, та вміннями практично їх застосувати (Мазорчук, 2019). Під час повномасштабного вторгнення РФ в Україну трансформація теоретичних знань у практичне застосування є одним із засобів формування здоров'язберігаючої компетентності кожного громадянина так і підвищення обороноздатності держави. Актуально розглядати розділи фізики через призму військової тематики. Це формуватиме розуміння принципів роботи багатьох сучасних пристроїв, сприятиме створенню причинно-наслідкових зв'язків та покращить ситуацію з поєднанням теорії з практикою. Саме розв'язування задач практичного змісту, зокрема і про РЕБ, якраз і відіграють ключову роль у цьому.

Аналіз останніх досліджень і публікацій.

З початком повномасштабного вторгнення РФ в Україну затверджено Закон України «Про основні засади державної політики у сфері утвердження української національної та громадянської ідентичності» (Верховна Рада, 2024), стаття 10 якого регламентує особливості військово-патріотичного виховання. У контексті цього закону вчителями-предметниками розробляються методичні розробки з елементами військової підготовки. Оскільки передавальне середовище ІКТ вивчається на уроках фізики, проаналізуємо останні публікації на цю тематику саме з фізики. Івашутою С.М. (Івашута, 2022) запропоновано методичну розробку «Фізика у військовій справі», де перелічено засоби нападу, захисту, розвідки та управління у контексті вивчення тем шкільного курсу фізики без розгляду їх фізичних принципів роботи та технічних характеристик. Шембелян Л.М (Шембелян, 2024) подає методичні рекомендації організації уроків фізики та астрономії, на яких змістовим навантаженням уроку використовуються науково-технічні досягнення України і виступають засобом формування національно-патріотичних якостей учнів.

Авторами (Величко, Головіна, Острей, Поліщук, 2024) розглянуто питання вивчення фізичних принципів військових дій як засобу

формування здоров'язберігаючої компетентності. Це одна із перших великих робіт такого плану, де розглянуто фізичну суть оповіщення повітряної тривоги; окреслено роль і місце спеціалізованих задач на військову тематику з використанням реальних технічних характеристик військових засобів на уроках фізики та інформатики. Крім того, (Величко, Острей, 2023) описують спосіб зменшення розриву між теорією і практикою у знаннях з фізики та інформатики, розглядаючи фізико-технологічні принципи роботи РЕБ. Продовженням цієї теми є розгляд фізичних принципів роботи антидронових рушниць (Величко, Острей, 2024).

Варто зауважити, що при порівнянні підручників з фізики, виданих за часів СРСР з підручниками Незалежної України, проглядається загальна тенденція гуманізації освіти: розгляд задач на військову тематику мінімізовано і трансформовано у розв'язування загальних задач без прив'язування змісту до конкретного типу зброї.

Метою роботи є підбір задач на військову тематику, що розкривають суть фізичних основ функціонування радіоелектронної боротьби.

Для досягнення мети необхідно виконати **завдання**:

- окреслити важливість розв'язування задач практичного змісту на уроках фізики;
- визначити роль і місце розв'язування задач про засоби радіоелектронної безпеки на уроках фізики;
- запропонувати ряд задач на військову тематику з РЕБ практичного змісту.

Результати дослідження. Державний стандарт базової середньої освіти (ДСБСО) (Кабінет Міністрів України, 2022) є основою для розроблення типових освітніх програм. Програмою «Фізика» (МОН, 2024) передбачено розв'язування задач: «За вимогами компетентнісного підходу задачі мають бути наближені до реальних умов життєдіяльності людини, спонукати до використання фізичних знань у життєвих ситуаціях.

Розв'язування фізичних задач зазвичай передбачає *три етапи діяльності учнів*:

- 1) аналіз фізичної проблеми або опис фізичної ситуації;
- 2) пошук фізичних законів і математичних методів для аналізу та опису фізичної моделі задачі;

3) реалізація розв'язку й аналіз одержаних результатів».

Як описано раніше авторами, первинне ознайомлення із засобами РЕБ варто розпочати на уроках фізики в 9 класі при вивченні теми: «Механічні та електромагнітні хвилі». Важливо наголосити на спільних ознаках та відмінностях між механічними та електромагнітними хвилями. Спільні ознаки: обидві хвилі описуються схожими математичними рівняннями та характеристиками (частота та фаза коливань, фронт хвилі, швидкість поширення). Відмінності: механічні хвилі поширюються лише у пружних середовищах, швидкість їх залежить від властивостей цього середовища (зокрема, від густини); можуть бути поздовжніми і поперечними; електромагнітні хвилі поширюються ще й у вакуумі і їх швидкість 300 000 км/с значно вища; є тільки поперечними.

При викладанні навчального матеріалу: «Фізичні основи сучасних бездротових засобів зв'язку та комунікацій», у одному із запропонованих для використання підручників авторства Засекоїної Т.М. (Засекаїна, 2017), крім вивчення принципів радіозв'язку, детально розглядається ще і радіолокація, а також пропонується ряд задач на практичне застосування цього явища. Саме тоді і варто акцентувати увагу на радіоелектронній розвідці (як одному з компонентів РЕБ), принцип дії якої базується на радіолокації.

Варто розглянути технологічне питання про можливість збільшення радіусу дії радіолокатора. Акцентувати увагу на будові засобів РЕБ і відмітити наявність антен. Також розглянути таблицю 1 технічних характеристик засобів РЕБ, створену авторами на основі (Розвідувальна підготовка, Засоби розвідки та радіоелектронної боротьби, 2022, 2023).

Таблиця 1

Тактико-технічні характеристики РЕБ ворога, створена авторами на основі [15]–[16]

Назва комплексу	Діапазон технічного аналізу сигналів, МГц	Діапазон радіорозвідки, МГц	Діапазон радіопридушення, МГц	Випромінювана потужність, Вт	Ширина спрямованості передавальної антени, сектор бойової роботи град.: за кутом місця за азимутом	Точність пеленгації, град.	Максимальна дальність дії, км:
Ртуть-БМ	95 – 420	95 – 420	95 – 420	250	±150		
Мандат (Р-330)	1,5 – 1000	немає даних	немає даних	1000	немає даних	немає даних	< 60
Днабазол (Р-330М1П)	100 – 2000	100 – 2000	100 – 1900	немає даних	< 40, 90 – 120	3	немає даних
Москва-1 (шифр 1Л267)	200 – 2000 2860 – 3540 8000 – 17500	немає даних	немає даних	20000	0 – 30 0 – 360	немає даних	≥ 400
Красуха-2 (індекс 1Л269)	2900 – 3200	немає даних	немає даних	немає даних	0 – 10 0 – 360	немає даних	< 250
Дзюдоіст	0,01 – 20000	0,1 – 18000	0,1 – 10000	3500		2 – 3	5 – 20
Красуха-С4	8000 – 20000	2860 – 3540	2860 – 3540		0 – 5 360		< 250
Леер-2	0,1 – 18000	20 – 2700	30 – 2700	200 – 500	немає даних	3	або 6, або 40
Лорандит	20 – 2000	20 – 2000	137 – 174 410 – 470 100 – 500	100	немає даних	3	немає даних
Репеллент 1	200 – 6000	200 – 6000	200 – 6000	300 – 1000		≤ 2	10 – 30
Инфауна (РБ-531Б)	25 – 2500	немає даних	25 – 2500	75	немає даних	5	≤ 0,15
Шиповник-Аэро	25 – 2500	25 – 2500	25 – 100 400 – 500 800 – 925 2400 – 2485	немає даних	360	3	5 – 20

Слід звернути увагу на способи отримання інформації про технічні характеристики: за допомогою розвідданих, а також військовими у бойових діях, при ураженні ворожих РЕБ та вивченні їх будови. Важливо наголосити, що кожна зі сторін конфлікту намагається максимально засекретити дані про свої РЕБ і поширити дані про РЕБ ворога. Адже відкриті технічні характеристики дозволяють інженерам розробляти нові засоби РЕБ. Інформація про українські засоби РЕБ є засекречена.

На основі цього зробити висновок, що для збільшення радіуса дії радіолокатора застосовують напрямлені або параболічні антени, які зменшують втрати енергії у небажаному напрямку.

Запропонуємо одну з можливих задач, створену на основі реальних технічних характеристик ворожих засобів РЕБ.

Задача 1

Локатор комплексу Дзюдоист працює на частоті 0,01 МГц. На якій відстані комплекс може виявити ціль?	
$\nu = 0,01 \text{ МГц}$, $S_{\text{max}} - ?$	Проміжок часу протягом якого електромагнітна хвиля проходить відстань від локатора до цілі і назад не повинен бути більший за період цієї хвилі. Адже в іншому випадку відбитий сигнал не встигне повернутись до того часу, поки електронний промінь описує коло на екрані. $t \leq T, \quad T = \frac{1}{\nu}$ Цей проміжок часу не повинен бути меншим за тривалість одного імпульсу. Тому що буде відбуватись накладання прямого та відбитого сигналів. $S = cT$ $S_{\text{max}} = \frac{c}{2\nu} = \frac{3 \cdot 10^8}{2 \cdot 0,01 \cdot 10^6} = 15000 \text{ м} = 15 \text{ км}$

Радіохвилі з різними довжинами біля поверхні Землі поширюються по-різному: довгі поширюються далеко за межі видимого горизонту, тому їх можна приймати за межами прямої видимості антени; середні – на меншій відстані за межі прямої видимості. Ультракороткі – поширюються у зоні прямої видимості. Для цього будують спеціальні радіотрансляційні станції. Вони знаходяться в зоні прямої видимості, приймають і передають хвилі одна одній, змінюючи частоту в межах свого діапазону.

Під час радіозв'язку електромагнітні коливання звукової частоти від передавача передаються на великі відстані. Причому, на невеликих відстанях від антени вони швидко затухають і інтенсивність випромінювання стає малою. Тому потрібну інформацію переносять саме високочастотні хвилі. Для цього у передавачі високочастотні коливання змінюють (модулюють) коливаннями низької звукової частоти. Інформація, що міститься у звуковому сигналі, переноситься від передавача до приймача саме завдяки великій енергії високочастотних

коливань, які і називають *несучими*. Тому засоби РЕБ мають різні діапазони роботи в залежності від їх призначення (див табл.1.). Якщо потрібно перехоплювати/глушити сигнал рації, використовується невеликий радіус дальності. А якщо доводиться працювати з GPS передавачами, то радіус дальності значно більший.

Програмою передбачається виконання учнями навчальних проєктів, під час виконання яких «...важливо зацікавити учнів здобуттям знань і навичок, які знадобляться в житті. Для цього необхідно зважати на проблеми реального життя, для розв'язання яких учням потрібно застосовувати здобуті знання». Для 9 класу можна запропонувати такі теми навчальних проєктів: «Діапазони частот, які використовуються військовими», «Поняття РЕБ, та його складові», «Засоби РЕБ ворога», «БПЛА, які використовуються військовими», «Засоби боротьби з БПЛА», тощо.

Окремі аспекти роботи РЕБ варто розглянути у 10 класі, вивчаючи тему: «Електричне поле». Зокрема, варто наголосити, що електричне поле виступає передавальним середовищем у бездротових технологіях передачі сигналу. І є фізичним середовищем роботи ІКТ.

Деталізацію роботи РЕБ варто проводити в 11 класі при вивченні теми «Електромагнітні коливання та хвилі» за програмою (МОН, 2018). Розглянувши поняття коливального контуру, варто наголосити, що цей пристрій є основою антидронових рушниць і генераторів перешкод. Для прикладу, можна розв'язати задачу:

Задача 2

При зміні струму в котушці індуктивності на величину 1 А за час 0,6 с в ній виникає ЕРС 0,2 мВ. Яку довжину λ буде мати хвиля, що випромінюється генератором, контур якого складається із цієї котушки та конденсатора ємністю 14100 пФ?	
$\Delta I = 1 \text{ А}$ $\Delta t = 0,6 \text{ с}$ $\epsilon_i = 0,2 \text{ мВ}$, $C = 14100 \text{ пФ}$ $\lambda = ?$	Згідно з законом Фарадея: $\epsilon_i = L \frac{\Delta I}{\Delta t}$ $L = \frac{\epsilon_i \Delta t}{\Delta I}$ Оскільки $T = 2\pi\sqrt{LC}$, то $T = 2\pi\sqrt{\frac{\epsilon_i \Delta t}{\Delta I} C}$ $\lambda = cT = 2\pi c \sqrt{\frac{\epsilon_i \Delta t}{\Delta I} C} \approx 2,45 \text{ км}$

Вивчаючи «Принципи радіотелефонного зв'язку. Радіомовлення та телебачення» варто зупинитися на їх використанні у радіоелектронній боротьбі – військових діях, в ході яких використовуються електромагнітна енергія для забезпечення обізнаності про ситуацію та створення наступальних і оборонних ефектів.

Передача та прийом сигналу у радіолокаторі здійснюється за допомогою антени в імпульсному режимі. Вона формує гостро напрямлений пучок випромінювання та за формою нагадує прожектор. Протягом дрібної частки секунди антена випромінює сигнал, а в проміжках між ними приймає слабкі сигнали, відбиті від предметів. Інтервал часу, протягом якого сигнал рухається до цілі та назад є малим.

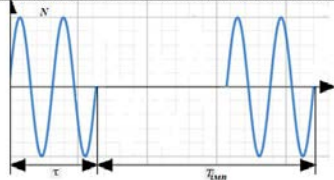
Вважаємо за необхідне запропонувати проаналізувати та розв'язати задачі на знаходження мінімальної та максимальної відстані визначення цілі.

Визначення мінімальної відстані до цілі:

Задача 3

Радіолокатор працює на хвилі 5 см та випромінює імпульси 1,5 мкс. Скільки коливань міститься у кожному імпульсі? Яка мінімальна дальність визначення цілі?

$\lambda = 5$ см,
 $\tau = 1,5$ мкс,
 $N = ?$
 $l_{min} = ?$



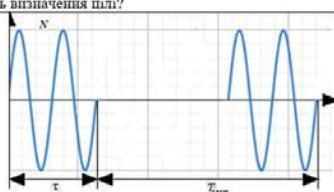
Локатор випромінює короткі імпульси. Їх кількість:
 $N = \frac{\tau}{T}$
 Оскільки $T = \frac{\lambda}{c}$, то $N = \frac{c\tau}{\lambda}$
 Поки локатор передає сигнал, він сліпий, тобто не бачить відбитий сигнал. За цей час не повинен прийти відбитий промінь. Час проходження сигналу до цілі і назад:
 $t = \frac{2l}{c}$
 За цей час повинні закінчитись імпульси тривалістю τ .
 Тобто $t \geq \tau$, $\tau = \frac{2l_{min}}{c}$
 $l_{min} = \frac{c\tau}{2}$
 Проведемо обчислення.
 $N = \frac{c\tau}{\lambda} = 9000$ коливань у імпульсі
 $l_{min} = \frac{c\tau}{2} = 225$ м. Тобто ближче ніж 225 м локатор ціль не побачить.

Визначення максимальної відстані до цілі:

Задача 4

Радіолокатор працює на хвилі 15 см та випромінює імпульси частотою 4 кГц та тривалістю 2 мкс кожен. Скільки коливань міститься у одному імпульсі? Яка максимальна дальність визначення цілі?

$\lambda = 15$ см,
 $\nu_{imp} = 4$ кГц,
 $\tau = 2$ мкс,
 $N = ?$
 $l_{max} = ?$



Локатор випромінює короткі імпульси. Їх кількість:
 $N = \frac{\tau}{T}$
 Оскільки $T = \frac{\lambda}{c}$, то $N = \frac{c\tau}{\lambda}$
 Поки локатор передає сигнал, він сліпий, тобто не бачить відбитий сигнал. За цей час не повинен прийти відбитий промінь. Час проходження сигналу до цілі і назад:
 $t = \frac{2l}{c}$
 Для того, щоб локатор працював в нормальному режимі, відбитий від цілі сигнал повинен повернутись раніше, ніж локатор пошле наступний імпульс.
 Тобто $t \leq T_{imp}$; $T_{imp} = \frac{2l_{max}}{c}$
 $l_{max} = \frac{cT_{imp}}{2}$; $T_{imp} = \frac{1}{\nu_{imp}}$; $l_{max} = \frac{c}{2\nu_{imp}}$
 Проведемо обчислення.
 $N = \frac{c\tau}{\lambda} = 4000$ коливань у імпульсі
 $l_{max} = \frac{c}{2\nu_{imp}} = 37500$ м. Тобто, локатор, що працює в заданому режимі визначить ціль на відстані 37,5 км.

Варто наголосити, що діапазон частот роботи РЕБ залежить від характеристик антен, що ілюструватиме залежність передавального середовища ІКТ від технічних характеристик апаратного забезпечення. Продемонструємо це під час розв'язування ряду задач:

Задача 5

Радіоперехоплювач має діаметр антени 2 м. Який діапазон частот може перехоплювати цей радіоперехоплювач?	
$c = 3 \cdot 10^8$ $r = 2$ м	Ширина смуги пропускання антени визначається за формулою: $\Delta f = \frac{c}{2\pi r}$ Δf – ширина смуги пропускання, Гц; c – швидкість світла, м/с; r – радіус антени, м. У нашому випадку радіус антени становить 1 м. Тоді ширина смуги пропускання антени дорівнює $\Delta f = \frac{3 \cdot 10^8}{2 \cdot 3,14 \cdot 1} = 47770700 \text{ Гц} \approx 50 \text{ МГц}$

Задача 6

Дві електромагнітні хвилі мобільного автоматизованого комплексу РЕБ “Леер-2” на базі бронеавтомобіля “Тигр” йдуть: одна з частотою 10 ГГц, а друга з частотою 20 ГГц. Які кути між напрямками поширення цих хвиль, якщо їхня результуюча інтенсивність максимальна?	
$f_1 = 10$ ГГц $f_2 = 20$ ГГц	Для максимальної інтенсивності результуючої хвилі кути між напрямками поширення двох складових хвиль повинні бути рівні 90°. Розглянути на уроці поняття: ширина спрямованості передавальної антени, сектор бойової роботи в градусах: за кутом місця, за азимутном.

Задача 7

Для впевненого прийому потужність коливань в приймальній антені повинна бути не менше 20 мкВт. Якою повинна бути площа антени, якщо відстань до ретранслятора 25 км, а потужність випромінювання 150 кВт? Врахувати, що випромінювання рівномірне у всіх напрямках.	
$P_a = 20$ мкВт $P_0 = 150$ кВт $r = 25$ км $S_a = ?$	Хвильова поверхня у вигляді сфери радіуса r . Потужність випромінювання P_0 рівномірно розподіляється по усій поверхні сфери. $\frac{P_a}{S_a} = \frac{P_0}{4\pi r^2}$ Якщо приймальна антена перпендикулярна до напрямку поширення електромагнітних хвиль, то на неї буде падати електромагнітне випромінювання потужністю: $P_a = \frac{P_0 S_a}{4\pi r^2}$, тоді площа антени $S_a = \frac{P_a 4\pi r^2}{P_0} = 1 \text{ м}^2$

Задача 8

Комплекс РР та РЕБ «Ртуть-БМ» створює перешкоди в діапазоні частот від 95 до 420 МГц. Потужність перешкоди становить 250 Вт. Як змінюється площа радіоелектронного поля перешкоди в межах діапазону частот, якщо її спрямованість становить 60°?	
$f_1 = 95 \text{ МГц}$ $f_2 = 420 \text{ МГц}$ $P = 250 \text{ Вт}$ $\alpha = 60^\circ$	Розглянути на уроці поняття: радіоелектронне поле перешкоди, яке створюється в усіх напрямках, але його потужність у різних напрямках неоднакова. Напрямок, у якому потужність перешкоди найбільша, називається напрямком найбільшої спрямованості. У нашому випадку радіоелектронне поле перешкоди має спрямованість 60°. Це означає, що потужність перешкоди в напрямку найбільшої спрямованості становить 250 Вт, а в інших напрямках вона менша. Щоб визначити площу радіоелектронного поля перешкоди, потрібно знайти площу сфери радіусом, рівним довжині хвилі перешкоди. Довжина хвилі перешкоди визначається за формулою: $\lambda = \frac{c}{f}$ λ – довжина хвилі, м; c – швидкість світла, м/с; f – частота перешкоди, Гц. $\lambda_1 = \frac{3 \cdot 10^8}{95 \cdot 10^6} = 3,16 \text{ м}$ $\lambda_2 = \frac{3 \cdot 10^8}{420 \cdot 10^6} = 0,71 \text{ м}$ Площа сфери відповідних радіусів дорівнює: Площа сфери відповідних радіусів дорівнює: $S_1 = 4\pi r^2 = 4 \cdot \pi \cdot 3,16^2 = 4\pi \cdot 9,98 \text{ м}^2 \approx 40 \pi \text{ м}^2 \approx 125,6 \text{ м}^2$ $S_2 = 4\pi r^2 = 4 \cdot \pi \cdot 0,71^2 = 4\pi \cdot 0,50 \text{ м}^2 \approx 2 \pi \text{ м}^2 \approx 6,28 \text{ м}^2$ Оскільки радіоелектронне поле перешкоди має спрямованість 60°, то площа радіоелектронного поля перешкоди, в якій потужність перешкоди найбільша, дорівнює: $S = \frac{40\pi}{2} = 20\pi = 62,8 \text{ м}^2$ або $3,14 \text{ м}^2$; змінюється в межах діапазону частот.

Програмою передбачається проведення уроків «Узагальнення та повторення навчального матеріалу на основі досягнень фізики та технологій», де очікуваними результатами навчально-пізнавальної діяльності є оперування «поняттями з різних розділів фізики для пояснення фізичних основ дії одного з названих досягнень сучасних технологій». Реалізація проєктної діяльності в 11 класі дає «широкі

можливості вибору тематики проєктів забезпечує різноманітність напрямів діяльності учнів – від теоретичних розробок і обґрунтувань до експериментальних досліджень та конструкторських рішень». Якщо рівень знань та наявність у школярів дитячих радіокерованих іграшок дозволяють, то під час виконання проєктів учням варто запропонувати визначити їх технічні характеристики, спробувати створити засоби, що завадять управлінню цими іграшками. Таким чином, вивчаючи практично принципи дії радіокерованих пристроїв, за методом аналогій формуватиметься розуміння управління БПЛА. Адже сучасні військові дії називають «Війною дронів», то вивчення будови та принципів роботи як БПЛА так і засобів протидії БПЛА виступає однією з найактуальніших тем сьогодення України. Вивчення фізичних основ функціонування військових засобів, є не тільки поглибленням знань з фізики, а й способом здобуття первинних практичних військових знань.

Висновки та перспективи подальших досліджень:

- Проаналізовано вивчення військової тематики на уроках фізики в цілому та радіоелектронних засобів боротьби, зокрема.
- Визначено роль і місце вивчення засобів радіоелектронної безпеки на уроках фізики.
- Запропоновано ряд задач на військову тематику з РЕБ практичного змісту з використанням тактико-технічних характеристик засобів радіоелектронної боротьби ворога.

Вивчення фізичних основ РЕБ дозволить здобувачам освіти:

- розвинути інтерес до природничих наук: РЕБ – це міждисциплінарна галузь, яка поєднує в собі знання з фізики, математики, електроніки та інформатики;
- розширити кругозір про сучасні технології, які використовуються під час воєнних дій;
- зрозуміти важливість науки для суспільства: РЕБ як важлива складова забезпечення національної безпеки;
- підготуватися до вибору майбутньої професії: вивчення РЕБ може стати першим кроком до вибору технічної спеціальності в університеті.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Alberts D. S., Papp D. S. *The Information Age Anthology, m. 1, The Information Age: An Anthology on Its Impact and Consequences*. CCRP, 1997.
2. Alberts D. S., Papp D. S. *The Information Age Anthology, m. 2, National Security Implications of the Information Age*. CCRP, 2000.
3. Alberts D. S., Papp D. S. *The Information Age Anthology, m. 3, The Information Age Military*. CCRP, 2001. URL: http://www.dodccrp.org/files/Alberts_Anthology_III.pdf.
4. Національний звіт за результатами міжнародного дослідження якості освіти PISA-2018 / кол. авт. : М. Мазорчук (осн. автор), Т. Вакуленко, В. Терещенко, Г. Бичко, К. Шумова, С. Раков, В. Горох та ін. ; Український центр оцінювання якості освіти. Київ : УЦОЯО, 2019. 439 с.
5. Про основні засади державної політики у сфері утвердження української національної та громадянської ідентичності: Закон України № 2834-IX / Верховна Рада України *Відомості Верховної Ради*, 2024. № 46, с. 116. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2834-20/ed20221213#Text>
6. Івашута С. Фізика у військовій справі. *Освітній проект «На Урок» для вчителів*. 2022. <https://naurok.com.ua/fizika-u-viyskoviy-spravi-313783.html>
7. Шембелян Л. Формування національно-патріотичних якостей учнів при вивченні фізики та астрономії. *Всеосвіта*. URL: <https://vseosvita.ua/library/embed/0100ev8p-f4dd.doc.html>
8. Величко, В., Головіна, Н., Острей, О., & Поліщук, Н. Вивчення фізичних принципів військових дій як засіб формування здоров'язберігаючої компетентності. *Фізика та освітні технології*, 2024. (1), 3–16. <https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-1>
9. Величко В., Острей О. Військова тематика при викладанні фізики та інформатики як спосіб усунення розриву між теоретичними та практичними знаннями, *Акт. проблеми розвитку природн. та гуманітар. наук*, Луцьк, Україна, 10 листоп. Луцьк: ВНУ ім. Лесі Українки, 2023, с. 145–147.
10. Величко В., Острей О. Вивчення фізичних принципів роботи антидронових рушниць як засіб військової підготовки молоді, *V-і читання Анатолія Вадимовича Свідзинського*, Луцьк, Україна, 29 лют.–1 берез. 2024. Луцьк: ВНУ ім. Лесі Українки, 2024, с. 11–13.
11. Про внесення змін до Державного стандарту базової середньої освіти: Постанова № 972, 27 / *Каб. Міністрів України*. 2022, 30 серп. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/972-2022-п#Text>
12. Навчальна програма для загальноосвітніх навчальних закладів, ФІЗИКА 7–9 класи: МОН України. URL: <https://mon.gov.ua/ua/osvita/zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi/navchalni-programi-5-9-klas>
13. Засєкіна Т. *Фізика : Підруч. для 9 кл. загальноосвіт. навч. закладів*. Київ: УОБЦ «Оріон», 2017.
14. Засоби радіоелектронної боротьби ворога. *Розвідувальна підготовка*. URL: <https://sprotyvg7.com.ua/lesson/zasobi-radioelektronnoi-borotbi-voroga>
15. Засоби розвідки та радіоелектронної боротьби. *Чтиво*. URL: https://shron1.chtyvo.org.ua/viiskova_sprava/Zasoby_rozvidky_ta_radioelektronnoi_borotby_ZS_RF.pdf
16. Навчальні програми для загальноосвітніх навчальних закладів, Фізика: МОН України. URL: <https://mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/programy-10-11-klas/2018-2019/fizika-10-11-avtorskij-kolektiv-pid-kerivnicztvom-lokteva-vm.pdf>

REFERENCES:

1. Alberts, D. S., & Papp, D. S. (1997). *The Information Age Anthology, vol. 1, The Information Age: An Anthology on Its Impact and Consequences*. CCRP. Accessed March 26, 2024. Retrieved from: http://www.dodccrp.org/files/Alberts_Anthology_I.pdf
2. Alberts, D. S., & Papp, D. S. (2000). *The Information Age Anthology, vol. 2, National Security Implications of the Information Age*. CCRP, Accessed March 26, 2024. Retrieved from: http://www.dodccrp.org/files/Alberts_Anthology_II.pdf
3. Alberts, D. S., & Papp, D. S. (2001). *The Information Age Anthology, vol. 3, The Information Age Military*. CCRP. Accessed March 26, 2024. Retrieved from: http://www.dodccrp.org/files/Alberts_Anthology_III.pdf.
4. Mazorchuk, M., Vakulenko, T., Tereshchenko, V., Bychko, H., Shumova, K., & Rakov, S. at al. (2019). *Natsional'nyy zvit za rezul'tatamy mizhnarodnykh doslidzen' yakosti osvity PISA-2018* [National report on the results of the international study of the quality of education PISA-2018]. *Ukrayins'kyi tsentr otsinyuvannya yakosti osvity - Ukrainian Center for Educational Quality Assessment*. Kyiv: UCEQA, 2019. 439 p. Accessed September 30, 2024. Retrieved from: https://pisa.testportal.gov.ua/wp-content/uploads/2019/12/PISA_2018_Report_UKR.pdf [in Ukrainian].
5. Pro osnovni zasady derzhavnoyi polityky u sferi utverdzhennya ukrayins'koyi natsional'noyi ta hromadyans'koyi identychnosti: Zakon Ukrayiny № 2834-IX [On main principles of the state policy in the sphere of establishment of the

Ukrainian national and civic identity: Law of Ukraine No. 2834-IX]. *Vidomosti Verkhovnoi Rada Ukrainy - Bulletin of the Verkhovna Rada of Ukraine*, 46, p. 116. Retrieved from: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/2834-20/ed20221213#Text> [in Ukrainian].

6. Ivashuta, S. (2022) Fyzyka u viys'koviy spravi [Physics in military affairs]. *Osvitniy proekt «Na Urok» dlya vchyteliv – Educational project "Na Urok" for teachers*. Retrieved from: <https://naurok.com.ua/fizika-u-viyskoviy-spravi-313783.html> [in Ukrainian].

7. Shembelyan, L. Formuvannya natsional'no-patriotichnykh yakostey uchniv pry vyvchenni fizyky ta astronomiyi [The formation of national and patriotic qualities of students when studying physics and astronomy]. *Vseosvita - General education*. Retrieved from: <https://vseosvita.ua/library/embed/0100ev8p-f4dd.doc.html> [in Ukrainian].

8. Velychko, V., Holovina, N., Ostrei, O., & Polishchuk, N. (2024) Vyvchennya fizychnykh pryntsyviv viys'kovykh diy yak zasib formuvannya zdorov'yazberihayuchoyi kompetentnosti [Study of the physical principles of military actions as a means of forming health-preserving competence]. *Fizyka ta osvitni tekhnolohiyi - Physics and Educational Technology*, 1, 3–16 [in Ukrainian].

9. Velychko, V., & Ostrei, O. (2023). Viys'kova tematyka pry vykladanni fizyky ta informatyky yak sposib usunennya rozryvu mizh teoretychnymy ta praktychnymy znannyamy [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 pryrodnychyykh ta humanitarnykh nauk - Actual problems of the development of natural sciences and humanities*. (pp.145-147). Luts'k: Lesya Ukrainka VNU [in Ukrainian].

10. Velychko, V., & Ostrei, O. (2024). Vyvchennya fizychnykh pryntsyviv roboty antydronovykh rushnyts' yak zasib viys'kovoyi pidhotovky molodi [Studying the physical principles of anti-drone guns as a means of military training for youth]. *V-i chytannya Anatoliya Vadymovycha Svidzyns'koho - 5th reading of Anatoliy Vadimovich Svidzinsky* (p. 11–13). Luts'k: Lesya Ukrainka VNU [in Ukrainian].

11. Postanova pro vnesennya zmin do Derzhavnogo standartu bazovoyi seredn'oyi osvity No. 972 [Resolution No. 972 On making changes to the State Standard of Basic Secondary Education]. (2022, August 30). *Kab. Ministriv Ukrayiny - Cabinet of Ministers of Ukraine* [in Ukrainian].

12. Navchal'na prohrama dlya zahal'noosvitnikh navchal'nykh zakladiv, FIZYKA 7–9 klasy [Educational programme for general educational institutions, Physics, Grades 7–9]. *MON Ukrayiny - Ministry of Education and Science of Ukraine*. Retrieved from: <https://mon.gov.ua/ua/osvita/zagalna-serednya-osvita/navchalni-programi/navchalni-programi-5-9-klas> [in Ukrainian].

13. Zasekina, T. (2017) Fyzyka : Pidruch. dlya 9 kl. zahal'noosvit. navch. zakladiv [Physics: Textbook for 9th grade of general educational institutions]. Kyiv: UOC "Orion" [in Ukrainian].

14. Zasoby radioelektronnoyi borot'by voroha [Means of radio-electronic warfare of the enemy]. Rozvidual'na pidhotovka - Intelligence training. (n.d.). Retrieved from: <https://sprotyvg7.com.ua/lesson/zasobi-radioelektronnoi-borotbi-voroga> [in Ukrainian].

15. Zasoby rozvidky ta radioelektronnoyi borot'by [Means of intelligence and electronic warfare]. *Chytyvo - reading material* (n.d.). Retrieved from: https://shron1.chytyvo.org.ua/viiskova_sprava/Zasoby_rozvidky_ta_radioelektronnoi_borotby_ZS_RF.pdf [in Ukrainian].

16. Navchal'ni prohramy dlya zahal'noosvitnikh navchal'nykh zakladiv, Fyzyka [Educational programs for general educational institutions. Physics]. Ministry of Education and Science of Ukraine. Retrieved from: <https://mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/programy-10-11-klas/2018-2019/fizika-10-11-avtorskij-kolektiv-pidkerivnicztvom-lokteva-vm.pdf> [in Ukrainian].

УДК 536.7:628.4

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-2>

В'ячеслав ВОЛОШИН

доктор технічних наук, професор, професор кафедри охорони праці та навколишнього середовища, Державний вищий навчальний заклад «Прийзовський державний технічний університет», вул. Гоголя, 29, м. Дніпро, Україна, 49044

ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0005-6809-6779>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57201116674

Бібліографічний опис статті: Волошин, В. (2024). Про одну особливість принципу термодинамічної двоєдності як причини появи промислових відходів. *Фізика та освітні технології*, 2, 12–18, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-2>

ПРО ОДНУ ОСОБЛИВІСТЬ ПРИНЦИПУ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ ДВОЄДИНОСТІ ЯК ПРИЧИНИ ПОЯВИ ПРОМИСЛОВИХ ВІДХОДІВ

Принцип термодинамічної двоєдності в прикладному сенсі дозволяє знаходити специфічні механізми мінімізації відходів у джерелі їх виникнення, в технологічному процесі, доказ чого є метою статті. В роботі розглянуто умови перерозподілу енергії та ентропії в системах з різним рівнем нерівноважності таким чином, що дозволяє збільшити цю нерівноважність відносно максимально можливої частини сировинних матеріалів. Існує методологічна аргументація, викладена І. Пригожиним, притаманна для цієї роботи, про те, що у відкритих термодинамічних системах ентропія може мати спроможність не збільшуватися у результаті енергетичних змін в цієї системі, шляхом своєї емісії в надсистему, і таким чином, звільняючи поле для тієї частини енергії, що йде на здійснення корисної роботи в цій системі. Другий закон об'єктивно охоплює не тільки дисипативні, але і зворотні репаративні процеси концентрації енергії і речовини, задля виникнення і розвитку складних відкритих систем у живій і неживій природі шляхом запозичення енергії у надсистеми. Посилаючись на це зроблено спробу перенести такі закономірності на процеси відходоутворення в виробничих системах. Показана поступова взаємна залежність між термодинамічними процесами, пов'язаними з технологіями виробництва готової продукції, та їх відходами, з одного боку, і дисипативно-репаративними взаємодіями як всередині системи, так і поза неї, з другого. Показано, що для створення умов для мінімізації відходів у джерелі їх виникнення – технологічному процесі, необхідно забезпечити перерозподіл ентропії між компонентами сировинної бази таким чином, щоб закладена в готовий продукт негентронія збільшувалась за рахунок зростання ентропії іншої матеріальної частини системи, і розповсюджувалась, в першу чергу, на ту частину сировини, якій приписуються властивості відходів. Це складає один з головних елементів наукової новизни в прикладному сенсі роботи. На прикладах надано опис процесів, для яких притаманні перерозподіли ентропії і протилежні їм процеси запозичення енергії з надсистеми в систему, що дозволяє забезпечити її синергізм відносно відходів.

Ключові слова: другий закон термодинаміки, термодинамічна двоєдність, емісія ентропії, технологічний процес.

Vyacheslav VOLOSHYN

Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor at the Department of Labor Protection and Environmental Protection, State Higher Education Institution "Pryazovskyi State Technical University", 29 Hoholia str., Dnipro, Ukraine, 49044

ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0005-6809-6779>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57201116674

To cite this article: Voloshyn, V. (2024). Pro odnu osoblyvist printsipy termodinamichnoi dvoedinosti yak prichyny poyavleniya promislovykh vidchodiv [On One Peculiarity of the Principle of Thermodynamic Duality as a Cause of Industrial Waste]. *Physics and Educational Technology*, 2, 12–18, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-2>

ON ONE PECULIARITY OF THE PRINCIPLE OF THERMODYNAMIC DUALITY AS A CAUSE OF INDUSTRIAL WASTE

The principle of thermodynamic duality in the applied sense allows finding specific mechanisms for minimizing waste at the source of their origin, in the technological process, the proof of which is the purpose of the article. The paper considers

the conditions of redistribution of energy and entropy in systems with different levels of non-equilibrium in such a way that allows to increase this non-equilibrium relative to the maximum possible part of raw materials. There is a methodological argument set forth by I. Prigozhin, inherent in this work, that in open thermodynamic systems, entropy may not be able to increase as a result of energy changes in this system, by emission to the supersystem, and thus freeing up the field for that part of the energy that goes to carry out useful work in this system. The second law objectively embraces not only dissipative, but also inverse reparative processes of concentration of energy and matter; for the emergence and development of complex open systems in animate and inanimate nature by borrowing energy from supersystems. Referring to this, an attempt is made to transfer such regularities to the processes of waste generation in production systems. The gradual mutual dependence between thermodynamic processes associated with technologies for the production of finished products and their waste, on the one hand, and dissipative-reparative interactions both inside and outside the system, on the other, is shown. It is shown that in order to create conditions for minimizing waste in the source of their origin – the technological process, it is necessary to ensure the redistribution of entropy between the components of the raw material base in such a way that the negentropy embedded in the finished product increases due to the increase in the entropy of the other material part of the system, and spreads, first of all, to that part of the raw material to which the properties of waste are attributed. This is one of the main elements of scientific novelty in the applied sense of the work. Using examples, a description of the processes characterized by redistributions of entropy and the opposite processes of borrowing energy from the supersystem to the system is provided, which allows to ensure its synergy with respect to waste.

Key words: second law of thermodynamics, thermodynamic duality, entropy emission, technological process.

Актуальність проблеми. Очевидна взаємна залежність між термодинамічними процесами, пов'язаними з технологіями виробництва готової продукції, та отриманням відходів, з одного боку, дисипативно-репаративними взаємодіями як всередині системи, так і поза неї (в надсистемі), а з другого, може бути основою для певної кількості засобів мінімізації відходів у виробничих системах. Актуальною для інженерної екології є спроба показати цю залежність як значущу в відношенні до сировинних матеріалів для певної кількості технологічних процесів, що може означати отримання чергового підтвердження принципу термодинамічної двоєдності як основи механізму утворення відходів у виробничих системах.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Принцип термодинамічної двоєдності є складовою частиною більш загального принципу термодинамічного дуалізму [1, с. 155, с. 158], як концепції, що передбачає співіснування двох різних, але взаємопов'язаних аспектів у термодинамічних системах, які існують сумісно для опису поведінки системи. Можна показати, що цей принцип відіграє значну роль у величезній кількості існуючих технологічних процесів, зокрема, будучи відповідальним за появу промислових відходів, за значне забруднення навколишнього середовища, що робить його вивчення надзвичайно актуальним [2, с. 37].

В основі принципу термодинамічної двоєдності, який відповідає за механізми утворення відходів в будь-яких технологічних процесах, знаходиться розуміння того, що один і той же технологічний процес по відношенню до певної частини компонентів сировини проявляє себе

як сильно нерівноважна система і функціонує за законами нелінійної термодинаміки і, в той же час, по відношенню до іншої частини сировини проявляє себе як слабо нерівноважна, або така, що знаходиться в стані термодинамічної рівноваги, і підкоряється законам лінійної термодинаміки [2, с. 396]. В результаті ми отримуємо, відповідно, готову продукцію і відходи. Такий принцип повинен повністю відповідати умовам другого закону термодинаміки, що має робити його легітимним в для будь-яких технологічних процесів. В роботі [3] запропоновано спосіб мінімізації відходів у джерелах їх походження, в технологічному процесі, що, може стати одним з актуальних методів управління відходами, може стати орієнтиром для створення технологій, що наближені до безвідходних. Доречно буде звернутися на давні роботи групи І. Р. Пригожина [4, с. 11, 5, с. 4591] та сучасні роботи [3, с. 326, 6, с. 22] про важливу, але не завжди враховану інтерпретацію другого закону термодинаміки. Вона полягає в тому, що, як закон природи, другий закон об'єктивно охоплює не тільки дисипативні, але і зворотні репаративні процеси концентрації енергії і речовини, виникнення і розвиток складних відкритих систем у живій і неживій природі, які здійснюються шляхом запозичення енергії у надсистемі. Підкреслюється дисипативно-репаративне сполучення енергетичних перетворень, що приводить до конструктивного результату, спрямованого на зниження ентропії системи таким чином, що $dS_v = dS_f + dS_i + dS_p \geq 0$, де індекси «f», «i», «p» позначають складові ентропії відкритої системи, а саме визначають її форму, інтенсивність

і щільність, а знак ($\pm$) позначає вектор зміни відповідної ентропії дисипативного і репаративного напрямків відповідно [4, с. 21].

Мета дослідження. Надати аргументацію на користь використання принципу термодинамічної двоєдності, як основи для механізму виникнення відходів у технологічному процесі, а саме, за рахунок емісії ентропії та забезпечення зустрічного запозичення енергії, спроможної по іншому впливати на ту сировину, яка в рівноважному стані становляться потенційними відходами.

Виклад основного матеріалу дослідження. Особливістю традиційного технологічного процесу є перерозподіл використовуваної енергії за якістю і її резервування для переробки тільки тієї частини сировини, з якої потім отримується товарний продукт (рис. 1). Але водночас, в результаті такого запозичення якісної енергії, витраченої на виробництво корисних продуктів, зростає частка ентропії ΔS_o , що осідає в спонтанно перероблений, але «непотрібний» матеріальній частині виробництва – відходах.

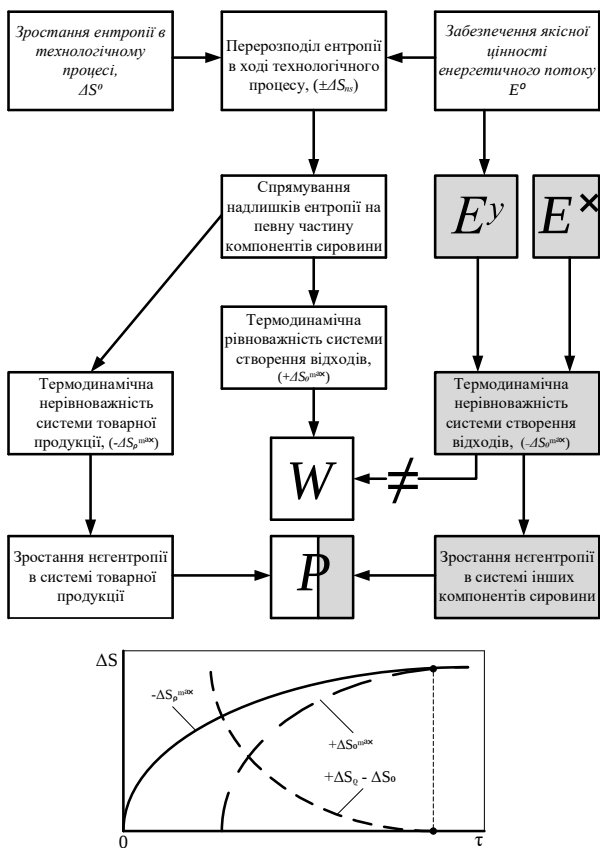


Рис. 1. Умови перерозподілу ентропії і негентропії в процесі виробництва корисних продуктів та її графічна інтерпретація

В результаті такого запозичення якісної енергії, витраченої на виробництво корисних продуктів, зазвичай, зростає частка ентропії, що осідає в якомось перероблений, але «непотрібний» матеріальній частині виробництва – відходах.

Якщо об'єктом аналізу енергетичної ентропії є нерівноважна неізольована система, в якій протікають як дисипативні, так і впорядковані, репаративні процеси перетворення енергії і речовини, то другий закон для інтегральної ентропії можна записати у вигляді $\Delta S_k = \sum \Delta S_k^{\pm} \geq 0$, де $\Delta S_k^{\pm}$ відноситься до тієї з k -их властивостей, які в даній системі змінюються в дисипативному ($\Delta S_k^+ > 0$) або репаративному ($\Delta S_k^+ \leq 0$) напрямках.

Таблиця 1

Принцип термодинамічної двоєдності та управління ентропією в нерівноважних системах, що відносяться до технологічних процесів (тіньові області відносяться до умов термодинамічної нерівноважності)

Параметр	Надсистема	Система	Підсистема i-1	Підсистема i-2
Вихідна енергія: - від зовнішнього джерела - від внутрішнього джерела	E_{i+1}^0 $E^* = \Delta E_{i+1}^* + \Delta E_{i-1}^*$ $E^v = \Delta E_{i+1}^v + \Delta E_{i-1}^v$	$E_i^0 = E_{i-1}^0 + E_{i-2}^0$ $E_i^* = E_{i-1}^* + E_{i-2}^*$ $E_i^v = E_{i-1}^v + E_{i-2}^v$	E_{i-1}^0 $E_{i-1}^* = \Delta E_{i-1}^* + \Delta E_{i-2}^*$ $E_{i-1}^v = \Delta E_{i-1}^v + \Delta E_{i-2}^v$	E_{i-2}^0 $E_{i-2}^* = \Delta E_{i-2}^* + \Delta E_{i-3}^*$ $E_{i-2}^v = \Delta E_{i-2}^v + \Delta E_{i-3}^v$
Вихідна ентропія: Перехід ентропії з підсистеми (i-2) до надсистеми (i+1) Перехід ентропії з підсистеми (i-2) до системи (i) Перехід ентропії з підсистеми (i-1) та підсистеми (i-2) до надсистеми (i+1)	S_{i+1}^0 S_i^0 $S_{i+1}^0 + \Delta S_{i+1}$ $S_i^0 + \Delta S_{i+1}$ S_i^0 або $(S_i^0 + \Delta S_{i+1} + \Delta S_{i-2})$	S_i^0 $S_i^0 + \Delta S_{i-2}$ $S_i^0 + \Delta S_{i-2}$ $S_i^0 + \Delta S_{i-2}$ S_i^0 або $(S_i^0 + \Delta S_{i-1} + \Delta S_{i-2})$	S_{i-1}^0 $S_{i-1}^0 + \Delta S_{i-2}$ $S_{i-1}^0 + \Delta S_{i-2}$ $S_{i-1}^0 + \Delta S_{i-2}$ S_{i-1}^0 або $(S_{i-1}^0 + \Delta S_{i-1} + \Delta S_{i-2})$	S_{i-2}^0 $S_{i-2}^0 + \Delta S_{i-3}$ $S_{i-2}^0 + \Delta S_{i-3}$ $S_{i-2}^0 + \Delta S_{i-3}$ S_{i-2}^0 або $(S_{i-2}^0 + \Delta S_{i-2} + \Delta S_{i-3})$
Сировина, матеріали - для традиційної технології - для системи в сильній термодинамічній нерівноважності	C_{i+1}^0 C_i^0	C_i^0 $C_i^0 = \frac{W_{i-1} - C_{i-1}^0}{W} + \frac{P_{i-2} - C_{i-2}^0}{P}$ $\frac{W_{i-1} + P_{i-1}}{W} + \frac{C_{i-2}^0}{P}$	C_{i-1}^0 $C_{i-1}^0 = \frac{W_{i-2} - C_{i-2}^0}{W} + \frac{P_{i-3} - C_{i-3}^0}{P}$ $\frac{W_{i-2} + P_{i-2}}{W} + \frac{C_{i-3}^0}{P}$	C_{i-2}^0 $C_{i-2}^0 = \frac{W_{i-3} - C_{i-3}^0}{W} + \frac{P_{i-4} - C_{i-4}^0}{P}$ $\frac{W_{i-3} + P_{i-3}}{W} + \frac{C_{i-4}^0}{P}$

Таке розуміння слідства з другого закону термодинаміки дозволяє зробити висновки, які раніше не використовувалися для опису механізмів утворення відходів у виробничих системах. А саме. Якщо говорити про те, що другий закон тільки в замкнутій системі відображає зниження якості енергії в потоках, і ці потоки також описують матеріальні компоненти

системи, то слід вважати, що в результаті реалізації технологічного процесу, здійснюваного в термодинамічно нерівноважній неізолюваній системі, відбувається наступна, вже знайома нам, узагальнююча реструктуризація до якої належить певна i -та система, яка сама має дві підсистеми ($i-1$) – виробництво відходів та ($i-2$)-виробництво корисної продукції, ентропії (табл. 1).

А саме: якщо ми прийнемо за основу $(i+1)$ -ту надсистему, до якої належить певна i -та система, то для такої надсистеми загальна кількість ентропії ($S_{i+1}^0 + \Delta S_{i-2}$), згідно з другим законом, збільшується. Водночас відбувається перерозподіл ентропії між складовими компонентами виробничої системи, а саме: між тими, що споживають енергією ($E_{i-2}^0 + \Delta E_2^x$) на перетворення «корисної» частини сировини у продукцію, з одного боку, і енергію ($E_{i-1}^0 + \Delta E_1^x$) для «непотрібної» частин матеріального потоку сировинної бази з другого. Тут E^0 – базова енергія відповідних індексам підсистем; ΔE_1^x та ΔE_2^x – часткові долі зовнішньої енергії в двох підсистемах основної системи. Як правило, перерозподіл ентропії між компонентами матеріальної бази типової виробничої системи відбувається таким чином, що *закладена нами в готовий товарний продукт неген-тропія збільшується за рахунок зростання ентропії решти матеріальної частини системи, і в першу чергу, тієї, якій приписуються властивості відходів* (див. рис. 1). Це ще раз підтверджує існування термодинамічної двоєдності для певних виробничих систем.

Якщо в системі є така внутрішня енергія (E^y) або вона запозичується ззовні (E^x) з надсистеми, яка здатна перевести залишкову частину сировини по відношенню до себе в термодинамічно сильно нерівноважний стан (див. табл. 1), то можна говорити про умовну емісію частки ентропії ΔS_{i-2} з цієї системи в надсистему, з якої ця енергія вийшла. В цьому випадку в системі з'являється робота, здатна перевести розглянуту частину сировини зі складу відходів до складу товарного продукту.

Ентропія надсистеми збільшується принаймні на емісійну величину ентропії відходів самої системи. За певних умов емісія ентропії з системи перевищує межу ентропії самої системи, і тоді в цій системі можуть спостерігатися синергетичні ефекти. Це саме той випадок, який

належить принципу термодинамічної двоєдності, і який існує не супротив другого закону термодинаміки, коли в системі з'являється додаткова або існуюча, але модифікована енергія, яка може змінити стан тих компонентів, які при традиційних умовах перетворюються в відходи. У нашому випадку умовна робота, що виконується цією запозиченою енергією, буде більше, ніж в традиційному технологічному процесі, умовно на величину не збільшення ентропії в підсистемі ($i-1$), пов'язаної з утворенням відходів і її емісії в надсистему.

Додаткова або модифікована зовнішня енергія $E^x = \Delta E_1^x + \Delta E_2^x$ у вигляді своїх частин ΔE_1^x і ΔE_2^x в певній пропорції витрачається на дві підсистеми – ($i-1$) та ($i-2$) (див. табл. 1). Можливий варіант, коли модифікація джерела енергії здійснюється за рахунок внутрішньої енергії такої системи $E^y = \Delta E_1^y + \Delta E_2^y$ також у певній пропорції для вказаних двох підсистем.

Умовою отримання такої додаткової енергії $E^x + E^y$ є емісія ентропії з кожної з двох підсистем шляхом «транзиту» в надсистему ($i+1$) зі збільшенням її сумарної ентропії на величину ($\Delta S_{i-1} + \Delta S_{i-2}$). Але при цьому ентропія двох наших підсистем ($i-1$) і ($i-2$) сумарно зменшується, відповідно, на ΔS_{i-1} та ΔS_{i-2} . Та й ентропія самої i -ї системи, принаймні, не збільшується. Хоча б, в кінцевому результаті, може й зменшитися на величину ($\Delta S_{i-1} + \Delta S_{i-2}$). Різниця між підведеною енергією та функціями ($f(\Delta S_{i-1})$ і $\phi(\Delta S_{i-2})$), що нас цікавлять, її втрати у вигляді ентропії такої, що $(E^x + E^y) \rightarrow [f(\Delta S_{i-1}) + \phi(\Delta S_{i-2})]$, це й є додаткова робота, що здійснюється в підсистемах, що отримали сильну нерівноважність. У нашому випадку це робота щодо перетворення компонентів однієї з підсистем (наприклад, відходи – підсистема ($i-1$)) в корисні продукти.

Якісне поліпшення енергії в цій частині має бути пов'язане в першу чергу з її впорядкуванням у структурі вироблених корисних продуктів за рахунок цілеспрямованої технології перетворення сировини. Продукцію, що випускається, можна розглядати як підсистему, в структуру якої закладена якісна енергія даної виробничої системи.

На перший погляд, такі висновки слід застосовувати і до перетворення іншої частини сировини, яка потім перетворюється у відходи. Однак це не так. Порядок переробки сировини,

особливості фізичних, хімічних, механічних та інших процесів, що лежать в основі тієї чи іншої технології, найчастіше не сприяють використанню енергії певного типу, запозиченої ззовні, для впорядкування елементів тієї частини сировинної бази, яка стає відходами. Якість енергії, використовуваної в процесі виробництва для перетворення цієї другої частини сировини, практично ніколи не відповідає її структурі та якості, і мало впливає на якість її перетворення. Таким чином, у цю матеріальну частину системи закладається максимально можлива ентропія всього виробничого процесу (пов'язана з втратами як теплової енергії, так і неструктурованої речовини). Тому відмінною рисою системи, що відповідає за отримання відходів, може бути її термодинамічна рівноважність із максимальною ентропією (див. рис. 1).

Таким чином, основною властивістю відходів різного типу є не тільки їх низька споживча привабливість, але і те, що, потрапляючи в навколишнє середовище, вони є продуктами збільшення ентропійних процесів у цьому середовищі. У той же час будь-яка виробнича система є яскравою ілюстрацією сполучених дисипативно-репаративних процесів перетворення енергії і речовини [6, с. 14]. Ми глибоко переконані, що саме вони є основою механізмів утворення відходів.

Резюмуючи вищесказане, можна зупинитися на деяких ознаках, які можна прийняти стосовно принципу термодинамічної двоєдності які відповідні до другого закону термодинаміки і впливають з нього (табл. 2).

Як впливає з такого співвідношення, тільки сумісна взаємодія на структуру сировини та на

якість джерел енергії в технологічному процесі дозволяє досягати можливого результату, а саме, змінити особливості та якість тих компонентів сировини, що раніше потрапляли до стану відходів.

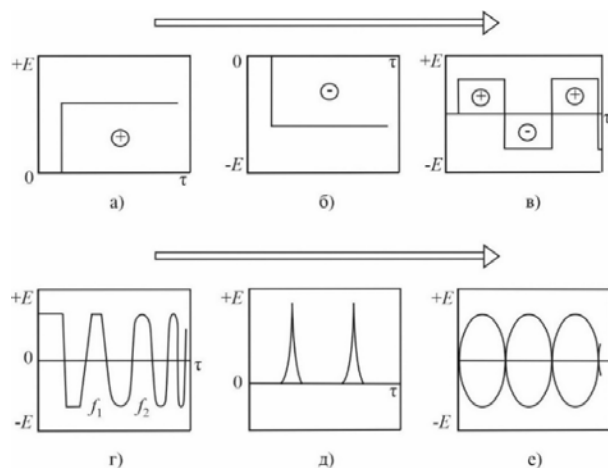


Рис. 2. Лінія розвитку характеристик енергетичного поля, що бере участь у технологічному процесі:

а) енергетичне поле постійного знаку; б) поле протилежного знаку; в) змінне енергетичне поле; г) високочастотне змінне поле; д) імпульсне енергетичне поле; е) резонансне частотне поле

В якості нового джерела енергії, крім основного, що бере участь в даному технологічному процесі, може виступати накладене енергетичне поле різної якості: *синхронізуючий енергетичний сигнал, вторинний енергетичний вплив, енергетична модуляція сильного сигналу більш слабким, резонансний ефект і т. д.*, зокрема, такі, що представлені на рис. 2.

Таблиця 2

Відповідність деяких ознак принципу термодинамічної двоєдності виробничої системи другому закону термодинаміки для відкритих систем

№№ з/п	Ознака	Другий закон термодинаміки	Відповідність у принципі двоєдності
1	Поводження енергії	Транзит енергії з відкритої системи в підсистему	Потрібність у додатковій енергії для переробки відходів
2	Поводження ентропії	Не збільшення ентропії відкритої системи та її емісія в надсистему	Видалення ентропії з системи з метою мінімізації відходів
3	Дисипативні процеси	Процеси втрати якості енергії при її витрачанні	Процеси переносу ентропії з продукції на відхід
4	Репаративні процеси	Процеси запозичення енергії та мінімізація ентропії в відкритій системі	Додаткова синергія відносно стану компонентів сировини, що відносяться до відходів
5	Дисипативно-репаративні взаємодії	Проява синергізму та максимальне використання якісної енергії в системі	Використання якісної енергії як для продукції, так і для дій щодо мінімізації відходів

З метою підвищення ефективності енергетичного впливу в технологічному процесі існують способи його послідовної модифікації, а саме забезпечення полем протилежного знаку, змінним у часі полем, високочастотним полем тієї ж якості, імпульсним енергетичним полем такої ж якості, як і основне. і, нарешті, енергетичне поле резонансного стану по відношенню до початкового, якщо ми маємо справу зі змінними полями. Кожна з цих модифікацій дає технологам нові можливості впливати на склад вихідної сировинної бази технологічного процесу в напрямку переробки всіх її компонентів.

Далеко не кожна нова енергія, задіяна в технологічному процесі, дозволяє мінімізувати одержувані відходи. Наприклад, відома в металургії практика модернізації мартенівських печей в 70-х роках минулого століття продувкою пічної ванни киснем і поява нового джерела теплової енергії – теплоти екзотермічних реакцій в зоні продувки ніяк не вплинули на необхідну якісну зміну складу і структури мартенівського шлаку, хоча і сприяли зниженню кількості чавуну, що подавалася в піч. Шлакова частина в печі, як і раніше, остаються лише інструментарієм для підвищення якості одержуваної стали нових марок і, як і раніше, відходами. Причому більшість компонентів, що входили до складу чавуну (Si, Mn, P, S, V, Cr і ін.), підлягали більш інтенсивному окисленню і додатково збільшували кількість шлаку. Однак, при цьому, за рахунок зменшення потреб у чавуні, відходи в паралельній системі можна зменшити, якщо розглядати як таке доменне виробництво (доменний шлак). Але це непрямий результат. Те ж саме, як і зменшення втрат металу при продуванні і пиловидаленні, а також у вигляді корольків у зливному шлаку.

З таких позицій більш раціональним є приклад використання в доменному агрегаті нового покоління такого джерела енергії, як електричний струм і умови високотемпературної електrolітичної дисоціації, при спроможності для

просторого розділу шлаків в нижній частині цього агрегату [2, с. 228]. Безумовно, це потребує додаткових досліджень, але таке джерело здатне, принаймні, цілеспрямовано впливати на структуру доменного шлаку в напрямку мінімізації оксидів і виносі їх з активної зони агрегату.

Ще одним прикладом є технологія розкרוу листового металу [7], що здатна відійти від відхідної обрізі за рахунок нових джерел енергії, що використовуються в технології. Таких прикладів ще дуже обмаль, зокрема [2, с. 342, 368, 8, с. 86], але вони тим більш важливі в якості аргументації відносно мінімізації відходів у сучасних технологіях. Всі вони виглядають, як проява відомих дисипативно-репаративних процесів, в основі яких лежить емісія ентропії та скриті можливості для мінімізації відходів у певних технологічних процесах.

Висновки та перспективи подальшого дослідження:

1. В основі принципу термодинамічної двоєдиності, в прикладному сенсі до процесів отримання відходів лежить здатність системи до перерозподілу якісної енергії всередині чи зовні системи та можливість одночасного перерозподілу ентропії в межах структурованої системи.

2. Показано можливості принципу термодинамічної двоєдиності як прикладного механізму мінімізації промислових відходів у технологічних процесах.

3. Для того, щоб задовольнити вимогу мінімізації відходів у джерелі їх виникнення, технологічному процесі, необхідно змінити якісну складову використовуваної енергії, мінімізувавши ентропію самого технологічного процесу і забезпечивши її спрямованість в надсистему.

4. Подібна методологія в прикладному сенсі знаходить прихильників як серед фахівців з інженерної екології, так і серед інженерів-технологів, особливо, якщо це стосується нових технологічних процесів.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Prigogine I. "The End of Certainty: Time, Chaos, and the New Laws of Nature". Free Press, 1997. 228 p.
2. Волошин В. С. Відходи та їх природа. Київ-Маріуполь, 2024. 630 с.
3. Волошин В. С. Щодо питання про методологію мінімізації відходів у джерелі їх виникнення - технологічному процесі. Київ. *Екологічні науки*. № 2 (53). 2024. С. 114–122.
4. Prigogine I. Etude Thermodynamique des Phenomenes Irreversibles. Paris: Dunon 1947. 77 p.

5. Prigogine I., George C. The Second Law as a Selection Principle: The Microscopic Theory of Dissipative Processes in Quantum Systems. *Proceeding of the National Academy of Science*. 1983. Vol. 80. P. 4590–4595.
6. Чаленко О. Ю. Самоорганізація, ентропія в природі та економіці. *Наука та інновації*. Київ, 2013. Т. 9, № 4. С. 13–24.
7. Бутенко Е. О., Волошин В. С. Сучасні технології очищення стічних вод промислових підприємств. V Міжнародна науково-технічна конференція «Водопостачання і водовідведення: проектування, будівництво, експлуатація, моніторинг» 2023, Україна, Львів. С. 86–87.
8. Волошин В. С., Бутенко Е. Ю. Відносно питання про деякі нормативні вимоги щодо питної води. V Міжнародна науково-практична конференція «Водопостачання та водовідведення: проектування, будівництво, експлуатація, моніторинг» 2023, Україна, Львів. С. 88–90.

REFERENCES:

1. Prigogine, I. (1997). *The End of Certainty: Time, Chaos, and the New Laws of Nature*. Free Press.
2. Voloshyn, V. S. (2024). *Vidchody ta ih priroda [Waste and its Naturality]*. Kiev-Mariupol [in Ukrainian].
3. Voloshyn, V. S. (2024). Schodo pytannia pro metodologiu minimizatsii vidchodiv u dzhereli ich viniknennia – technologichnomu protsesi [On the Issue of the Methodology of Waste Minimization in the Source of Their Origin – the Technological Process]. *Ekologichni nauki – Environmental Sciences*. № 2 (53). S.114–122. [in Ukrainian].
4. Prigogine, I. (1947). *Etude Thermodynamique des Phenomenes Irreversibles*. Paris: «Dunon».
5. Prigogine, I., & George, C. (1983). The Second Law as a Selection Principle: The Microscopic Theory of Dissipative Processes in Quantum Systems. *Proceeding of the National Academy of Science*. Vol. 80. P. 4590–4595.
6. Chalenko, O. U. (2013). Samoorganizatsia, entropia v prirode ta ekonomitsi [Self-organization, entropy in nature and economics]. *Nauka ta innovatsii - Science and innovations*. Vol. 9, № 4. S. 13–24 [in Ukrainian].
7. Butenko, E. O., & Voloshyn, V. S. (2023). Suchasni tehnologii ochischennia stichnuh vod promislovykh pidpriemstv [Modern Technologies for Industrial Wastewater Treatment]. V *Mizhnarodna naukovo-praktychna konferentsia «Vodopostachannia ta vodovidvedennia: proektuvannia, budivnitstvo, ekspluatatsia, monitoring» - The Five International Scientific and Practical Conference «Water Supply and Sewerage: Design, Construction, Operation, Monitoring»*. Ukraine, Lviv. S. 86–87 [in Ukrainian].
8. Voloshyn, V. S., & Butenko, E. O. (2023). Vidnosno pytannia pro deiaki normativni vimogy schodo pitnoi vody [Regarding the issue of some regulatory requirements for drinking water], Lviv. S. 88–90. V *Mizhnarodna naukovo-praktychna konferentsia «Vodopostachannia ta vodovidvedennia: proektuvannia, budivnitstvo, ekspluatatsia, monitoring» – The Five International Scientific and Practical Conference «Water Supply and Sewerage: Design, Construction, Operation, Monitoring»*, Ukraine [in Ukrainian].

УДК 37.091.313-044.247:[004:5:62]:53

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-3>

Ігор ЖАБРОВЕЦЬ

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/0009-0009-5881-9231>

Олександр МАРТИНЮК

доктор педагогічних наук, доцент, професор 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/0000-0003-4473-7883>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57224619200

Бібліографічний опис статті: Жабровець, І., Мартинюк, О. (2024). Основні тенденції впровадження концепції STEM в освітньому процесі з фізики. *Фізика та освітні технології*, 2, 19–26, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-3>

ОСНОВНІ ТЕНДЕНЦІЇ ВПРОВАДЖЕННЯ КОНЦЕПЦІЇ STEM В ОСВІТНЬОМУ ПРОЦЕСІ З ФІЗИКИ

Концепція, що об'єднує науку, технології, інженерію та математику, набуває все більшого значення у контексті підготовки учнів і студентів до роботи в сучасних високотехнологічних галузях економіки. У статті розглядаються основні тенденції впровадження концепції STEM (наука, технології, інженерія, математика) в освітній процес у 2024 році, зокрема у контексті сучасних викликів та можливостей. Описано використання штучного інтелекту для індивідуалізації навчання, впровадження іммерсивних технологій, таких як віртуальна та доповнена реальність, для глибшого розуміння матеріалу. Аналізуються способи подолання цифрового розриву та інтеграції принципів стійкості в освітні програми. Розглянуто переваги змішаного навчання та багатомодального підходу до викладання. Автори також висвітлюють основні виклики, з якими стикаються педагоги під час впровадження цих інновацій, та пропонують рекомендації для подальшого розвитку STEM-освіти. Результати дослідження підкреслюють важливість інтеграції сучасних технологій у STEM-освіту. Використання штучного інтелекту та віртуальної реальності показало суттєві переваги в освітньому процесі, зокрема можливість персоналізації навчання та покращення розуміння складних тем. ШІ виявився корисним для адаптації навчальних матеріалів під індивідуальні потреби учнів, що особливо важливо у класах з різнорівневими групами. VR та AR зробили навчання більш захоплюючим, допомагаючи учням краще засвоювати інформацію через інтерактивні та візуальні методи. Проте дослідження також виявило існуючі виклики, які стоять на шляху до повноцінної інтеграції цих технологій. Серед них – висока вартість обладнання, недостатня технічна підготовка учителів, а також значний цифровий розрив, що ускладнює доступ до технологій для учнів у малих містах та сільській місцевості. Ці фактори створюють нерівні умови для учнів і обмежують потенціал використання новітніх технологій.

Ключові слова: STEM-освіта, штучний інтелект, віртуальна реальність, доповнена реальність, цифровий розрив, змішане навчання, стійкий розвиток, багатомодальне навчання, освітні інновації, критичне мислення.

Ihor ZHABROVETS

Postgraduate Student, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0009-5881-9231>

Oleksandr MARTYNIUK

Doctor of Pedagogical Sciences, Associate Professor, 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/0000-0003-4473-7883>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57224619200

To cite this article: Zhabrovets, I., Martyniuk, O. (2024). Osnovni tendentsii vprovadzhennia kontseptsii STEM v osvithomu protsesi z fizyky [Main trends in the implementation of the STEM concept in the educational process in physics]. *Physics and Educational Technology*, 2, 19–26, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-3>

MAIN TRENDS IN THE IMPLEMENTATION OF THE STEM CONCEPT IN THE EDUCATIONAL PROCESS IN PHYSICS

The concept that unites science, technology, engineering and mathematics is gaining more and more importance in the context of preparing pupils and students to work in modern high-tech sectors of the economy. The article examines the main trends in the implementation of the STEM (science, technology, engineering, mathematics) concept in the educational process in 2024, in particular in the context of current challenges and opportunities. The article describes the use of artificial intelligence to individualise learning, the introduction of immersive technologies, such as virtual and augmented reality, for a deeper understanding of the material. The article analyses ways to bridge the digital divide and integrate sustainability principles into educational programmes. The advantages of blended learning and a multimodal approach to teaching are discussed. The authors also highlight the main challenges faced by educators in implementing these innovations and offer recommendations for the further development of STEM education. The results of the study emphasize the importance of integrating modern technologies into STEM education. The use of artificial intelligence and virtual reality has shown significant advantages in the educational process, in particular, the possibility of personalizing learning and improving the understanding of complex topics. AI has proven to be useful in adapting learning materials to the individual needs of students, which is especially important in classes with different levels of groups. VR and AR have made learning more immersive by helping students absorb information better through interactive and visual methods. However, the study also revealed existing challenges that stand in the way of the full integration of these technologies. Among them are the high cost of equipment, insufficient technical training of teachers, and a significant digital divide, which makes it difficult for students in small towns and rural areas to access technology. These factors create unequal conditions for students and limit the potential of using the latest technologies.

Key words: STEM education, artificial intelligence, virtual reality, augmented reality, digital divide, blended learning, sustainable development, multimodal learning, educational innovations, critical thinking.

Вступ. Постановка проблеми. У сучасному світі, де технологічний прогрес відбувається надзвичайно швидкими темпами, освітні системи стикаються з викликом підготовки майбутніх фахівців, здатних успішно адаптуватися до вимог ринку праці. Традиційні методи навчання часто не забезпечують необхідного рівня підготовки студентів до роботи у швидкозмінних умовах сучасного суспільства. Це створює необхідність для запровадження нових освітніх концепцій, таких як STEM (Science, Technology, Engineering, Mathematics), які дозволяють розвивати критичне мислення, інноваційні навички та здатність вирішувати комплексні проблеми.

Актуальність дослідження. У сучасному світі, що постійно змінюється під впливом глобалізації та стрімкого розвитку технологій, роль освіти стає ключовою у підготовці майбутніх поколінь до викликів майбутнього. Однією з найважливіших тенденцій у цій сфері є впровадження концепції STEM (Science, Technology, Engineering, Mathematics) в освітній процес. Ця концепція, що об'єднує науку, технології, інженерію та математику, набуває все більшого значення у контексті підготовки учнів і студентів до роботи в сучасних високотехнологічних галузях економіки. Глобалізація значно змінила економічний ландшафт світу, що призвело до інтеграції національних економік і розширення

міжнародної співпраці. Це, в свою чергу, вплинуло на вимоги до сучасної робочої сили, яка має бути не лише добре підготовленою в традиційних дисциплінах, але й володіти навичками, що відповідають викликам глобальної економіки. Зокрема, йдеться про здатність до швидкого адаптування, критичне мислення, інноваційний підхід та вміння працювати з новітніми технологіями (Kelley, 2016). В умовах стрімкого розвитку технологій, таких як штучний інтелект, робототехніка, біотехнології, а також цифровізація всіх сфер життя, виникає необхідність у фахівцях, які можуть інтегрувати ці знання та навички в різні галузі. STEM-освіта стає відповіддю на цей запит, оскільки вона спрямована на розвиток ключових компетентностей, необхідних для успішної кар'єри в умовах четвертої промислової революції. Однією з головних причин актуальності впровадження STEM-освіти є її здатність підготувати учнів та студентів до роботи у високотехнологічних галузях, які стають основою сучасної економіки. Традиційні методи навчання часто не відповідають вимогам сучасного ринку праці, де потрібні знання та навички у галузі науки, технологій, інженерії та математики (Sanders, 2009). STEM-освіта дозволяє учням і студентам не лише здобувати глибокі знання в цих сферах, але й розвивати практичні навички, які можуть бути безпосередньо застосовані у професійній діяльності. Наприклад, студенти, які навчалися за програмами STEM, можуть працювати у таких галузях, як інформаційні технології, машинобудування, біотехнології, космічна індустрія тощо. Вони здатні швидко адаптуватися до нових викликів, знаходити нестандартні рішення, працювати в міждисциплінарних командах і використовувати інноваційні підходи у своїй роботі (Honey, 2014). Сучасний ринок праці вимагає від випускників навчальних закладів не лише знань, але й практичних навичок, які можна застосувати в реальних умовах. STEM-освіта, яка орієнтована на практичне застосування знань, стає ключовим елементом у підготовці кадрів, здатних відповідати цим вимогам. Вона дозволяє інтегрувати теоретичні знання з практичними навичками, що сприяє розвитку в учнів і студентів здатності вирішувати складні проблеми, аналізувати інформацію, працювати в умовах невизначеності та приймати зважені рішення (Поліхун, 2019).

Один із аспектів, який підсилює актуальність дослідження, полягає у необхідності адаптації традиційних освітніх методик до нових умов. Зокрема, впровадження STEM-освіти вимагає змін у підходах до навчання, оновлення навчальних програм, залучення сучасних технологій та методик викладання. Це, у свою чергу, потребує від учителів закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО) нових знань і навичок, а також готовності до постійного професійного розвитку (Барна, 2017). Сучасні технологічні та соціальні зміни ставлять перед системою освіти завдання не лише передати знання, але й сформувати у молоді компетентності, які допоможуть їм успішно реалізуватися в майбутньому. STEM-освіта орієнтована на розвиток таких компетентностей, як критичне мислення, творчість, навички вирішення проблем, співпраця та комунікація. Вона забезпечує учнів та студентів не лише знаннями у конкретних предметних областях, але й навчає їх використовувати ці знання для вирішення реальних завдань.

Метою статті є аналіз основних тенденцій впровадження концепції STEM у освітній процес, зокрема шляхом використання новітніх технологій, таких як штучний інтелект, віртуальна та доповнена реальність. Дослідження спрямоване на виявлення ключових викликів і можливостей, з якими стикаються педагоги при впровадженні цих інновацій, а також на розробку рекомендацій для підвищення ефективності STEM-освіти.

Огляд літератури. Останніми роками з'явилася значна кількість досліджень, присвячених впровадженню STEM-освіти. Барна та Балик (2017) у своїй роботі досліджували етапи та моделі впровадження STEM-освіти у навчальних закладах, акцентуючи увагу на необхідності інтеграції міждисциплінарних підходів. Особливості впровадження STEM у початковій школі, зокрема вплив на формування основних компетентностей учнів проаналізовано в (Олексюк, 2017). У роботі (Свид, 2020) досліджено досвід створення регіональних центрів STEM-освіти, що сприяють розвитку технічних навичок молоді. У цих роботах підкреслюється важливість технологічної інтеграції та інноваційних методів навчання для підвищення якості освіти.

Гіпотези

1. Використання штучного інтелекту для індивідуалізації навчання у STEM-дисциплінах

значно підвищує академічні досягнення учнів, сприяючи розвитку критичного мислення та аналітичних навичок.

2. Інтеграція віртуальної та доповненої реальності в освітній процес сприяє глибшому розумінню складних наукових концепцій і підвищує мотивацію учнів до вивчення STEM-дисциплін.

Методологія. Дослідження зосереджено на аналізі основних тенденцій впровадження концепції STEM у освітній процес у 2024 році. Для досягнення цієї мети були використані два основні методи: онлайн-опитування та контент-аналіз. Онлайн-опитування було проведено серед невеликої групи учителів закладів загальної середньої освіти STEM-дисциплін для збору їхнього досвіду та ідентифікації основних викликів при впровадженні новітніх технологій. Контент-аналіз був спрямований на вивчення наукових публікацій та звітів, які висвітлюють сучасні тенденції у STEM-освіті.

Вибірка. Вибірка для онлайн-опитування складалася з 15 учителів закладів загальної середньої освіти, які працюють у загальноосвітніх школах та коледжах. Вони були обрані на основі добровільної участі, а основним критерієм було викладання дисциплін, пов'язаних зі STEM (математика, фізика, інформатика, технології). Такий підхід забезпечив достатньо репрезентативну вибірку для оцінки основних тенденцій у рамках даного дослідження.

Інструменти для збору даних. Для онлайн-опитування використовувалась анкета, яка включала 10 запитань закритого типу, що стосувалися досвіду учителів у використанні інноваційних технологій у навчанні, таких як штучний інтелект і віртуальна реальність. Для контент-аналізу були використані наукові публікації та статті з відкритих джерел, таких як Google Scholar, де проаналізовано близько 10 публікацій, що стосуються впровадження STEM у 2024 році.

Процедура проведення дослідження. Дослідження проводилося у два етапи. На першому етапі було здійснено онлайн-опитування учителів STEM-дисциплін, яке тривало протягом одного тижня. Опитування проводилося через платформу Google Forms, що забезпечувало зручний доступ для респондентів. На другому етапі був проведений контент-аналіз наукових публікацій, де виділялися основні тенденції у сфері STEM-

освіти, зокрема адаптація штучного інтелекту та використання іммерсивних технологій. Отримані дані були оброблені та проаналізовані для формулювання висновків і рекомендацій.

Результати. Дослідження, проведене для вивчення основних тенденцій впровадження концепції STEM у 2024 році, виявило кілька ключових аспектів, що стосуються використання новітніх технологій та викликів, з якими стикаються учителі закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО) в освітньому процесі.

Використання штучного інтелекту у навчанні. Одним із важливих аспектів дослідження було вивчення використання штучного інтелекту (ШІ) для індивідуалізації навчання (Bybee, 2010). Згідно з отриманими даними, приблизно 60% опитаних учителів закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО) зазначили, що вже використовують ШІ у своїй роботі для адаптації навчальних матеріалів під індивідуальні потреби учнів. Це дозволяє забезпечити більш персоналізований підхід, що особливо корисно для учнів з різним рівнем знань та швидкістю засвоєння матеріалу. Водночас близько 40% респондентів вказали на труднощі з інтеграцією ШІ через недостатню технічну підготовку та відсутність необхідної інфраструктури у школах (рис. 1, табл. 1).

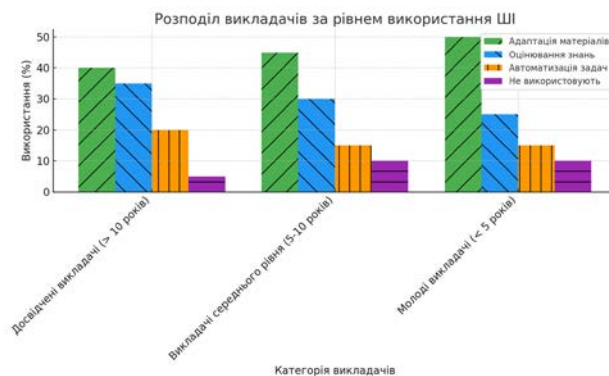


Рис. 1. Розподіл учителів за рівнем використання ШІ

Використання віртуальної та доповненої реальності. Віртуальна реальність (VR) та доповнена реальність (AR) поступово стають інструментами, які учителі закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО) все частіше застосовують у своїй роботі (Becker, 2011). Результати дослідження показали, що близько 45% вчителів використовують VR/AR для демонстрації

Таблиця 1

Розподіл учителів закладів загальної середньої освіти за рівнем використання ІІІ у навчальному процесі

Категорія учителів	Використання ІІІ для адаптації матеріалів (%)	Використання ІІІ для оцінювання знань (%)	Використання ІІІ для автоматизації адміністративних задач (%)	Не використовують ІІІ (%)
Досвідчені учителі (> 10 років)	40%	35%	20%	5%
Учителі середнього рівня (5-10 років)	45%	30%	15%	10%
Молоді учителі (< 5 років)	50%	25%	15%	10%

складних наукових концепцій у своїх уроках. Наприклад, такі технології використовуються для віртуальних екскурсій у космосі або для вивчення будови клітини. Однак, 55% опитаних зазначили, що через високу вартість обладнання та складність його інтеграції в навчальний процес, ці технології ще не набули повсюдного поширення (рис. 2, табл. 2).



Рис. 2. Відсоткове співвідношення учителів, які використовують VR та AR у своїй роботі

Подолання цифрового розриву. Цифровий розрив залишається суттєвим викликом у процесі впровадження STEM-

освіти. Дослідження показало, що приблизно 35% учнів у малих містах і селах не мають постійного доступу до Інтернету або необхідних цифрових пристроїв для навчання. Це ускладнює процес дистанційного навчання і знижує можливості для впровадження STEM-технологій. Учителі закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО) в цих регіонах намагаються компенсувати цей розрив шляхом використання друкованих матеріалів і проведення додаткових занять, але це не завжди вдається ефективно (рис. 3, табл. 3).

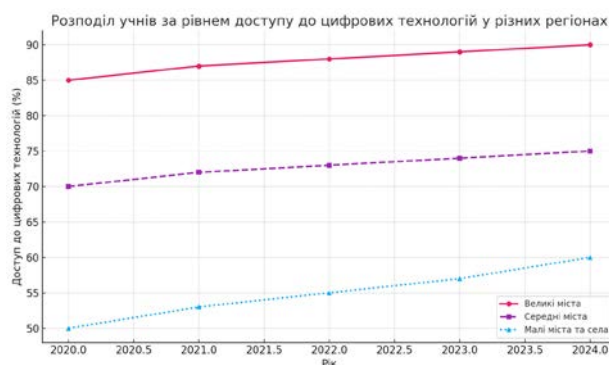


Рис. 3. Лінійний графік, що показує рівень доступу учнів до цифрових технологій у різних регіонах протягом останніх 5 років

Таблиця 2

Відсоткове співвідношення учителів, які використовують VR та AR у своїй роботі

Категорія учителів	Використання VR для візуалізації (%)	Використання AR для інтерактивного навчання (%)	Використання VR для експериментальних занять (%)	Не використовують VR/AR (%)
Учителі природничих наук	35%	40%	15%	10%
Учителі технічних дисциплін	40%	35%	20%	5%
Учителі гуманітарних дисциплін	25%	30%	20%	25%

Таблиця 3

Розподіл учнів за рівнем доступу до цифрових технологій у різних регіонах

Регіон	Учні з постійним доступом до Інтернету (%)	Учні з доступом до сучасних цифрових пристроїв (%)	Учні з обмеженим доступом (%)	Учні без доступу до технологій (%)
Великі міста	90%	85%	10%	5%
Середні міста	75%	70%	20%	5%
Малі міста та села	55%	50%	30%	15%

Акцент на стійкість у навчальних програмах. Стійкість стає все більш важливою темою у сучасній STEM-освіті. Приблизно 70% опитаних учителів зазначили, що інтегрують теми, пов'язані зі стійким розвитком, у свої уроки, наприклад, під час вивчення впливу людської діяльності на довкілля або розробки проєктів, спрямованих на зменшення вуглецевого сліду. Однак, існують значні розбіжності у рівні підготовки учителів до викладання таких тем, що вказує на необхідність додаткових тренінгів та навчальних матеріалів.

Інтеграція змішаного та багатомодального навчання. Змішане та багатомодальне навчання продовжують набирати популярності серед учителів. Близько 55% опитаних зазначили, що використовують ці підходи для покращення залучення учнів у процес навчання. Це включає поєднання традиційних методів викладання з онлайн-ресурсами, симуляціями та інтерактивними завданнями. Багатомодальний підхід також активно використовується для забезпечення різноманітності методів навчання, що відповідає потребам учнів з різними стилями навчання.

Обговорення. Інтерпретація отриманих результатів. Результати дослідження підтвердили важливість використання новітніх технологій у STEM-освіті, зокрема штучного інтелекту (ШІ) та віртуальної реальності (VR). Більшість учителів, які активно використовують ШІ, відзначають підвищення ефективності навчання завдяки можливості адаптації матеріалів під індивідуальні потреби учнів. Це свідчить про те, що технології можуть значно покращити якість освіти, особливо в умовах, коли учителі стикаються з необхідністю працювати з учнями, які мають різний рівень підготовки. Однак, значна частина учителів (близько 40%) вказують на труднощі з інтеграцією ШІ,

що свідчить про необхідність додаткової підготовки та підтримки.

Використання VR та AR також показало позитивний вплив на навчання, зокрема на розуміння складних концепцій. Учителі природничих та технічних дисциплін вказують на підвищення зацікавленості учнів та покращення їхнього розуміння предметів завдяки використанню цих технологій. Проте, існують обмеження, пов'язані з високою вартістю обладнання та складністю його інтеграції, що стримує широке впровадження VR/AR у навчальний процес.

Подолання цифрового розриву залишається актуальною проблемою, особливо для учнів у малих містах і селах. Відсутність доступу до Інтернету та сучасних цифрових пристроїв створює нерівні умови для навчання, що впливає на якість отриманої освіти. Учителі зазначають, що цей розрив стає серйозною перешкодою для впровадження STEM-освіти, особливо у форматі дистанційного навчання.

Порівняння з попередніми дослідженнями. Порівняння отриманих результатів із попередніми дослідженнями демонструє, що тенденція до впровадження новітніх технологій у STEM-освіті зростає. Дослідження, проведене Барною та Баликом (2017), акцентувало увагу на необхідності інтеграції технологій у навчальний процес, але тоді впровадження ШІ та VR було лише на початкових етапах. У нашому дослідженні спостерігається значне зростання використання цих технологій, що свідчить про прогрес у цьому напрямку (Барна, 2017). Дослідження Сvida, Чумака та Бойка (2020) також підкреслювало значення технологій у розвитку технічних навичок учнів, однак тоді питання подолання цифрового розриву було менш актуальним. Наші результати показують, що сьогодні ця проблема набуває все більшого

значення, оскільки дистанційне навчання стало нормою, і без доступу до технологій учні втрачають можливості для якісної освіти (Олексюк, 2017). Значущість отриманих результатів полягає в тому, що вони підкреслюють важливість інтеграції новітніх технологій у STEM-освіту для підвищення її якості. Використання ІІІ та VR/AR сприяє більш ефективному навчальному процесу, підвищує зацікавленість учнів та покращує їхні академічні результати. Однак, для досягнення максимального ефекту необхідно подолати ряд викликів, серед яких найважливішими є технічна підготовка учителів, доступність обладнання та подолання цифрового розриву.

Отримані результати також вказують на необхідність продовження досліджень у цій сфері, зокрема щодо впливу різних технологій на навчання у різних контекстах. Крім того, вони підкреслюють важливість державної підтримки у забезпеченні рівного доступу до технологій для всіх учнів, незалежно від їхнього місця проживання чи соціально-економічного статусу.

Висновки. Це дослідження підкреслило важливість інтеграції сучасних технологій у STEM-освіту. Використання штучного інтелекту (ІІІ) та віртуальної реальності (VR) показало суттєві переваги в освітньому процесі, зокрема можливість персоналізації навчання та покращення розуміння складних тем. ІІІ виявився корисним для адаптації навчальних матеріалів під індивідуальні потреби учнів, що особливо важливо у класах з різнорівневими групами. VR та AR (доповнена реальність) зробили навчання більш захоплюючим, допомагаючи учням краще засвоювати інформацію через інтерактивні та візуальні методи.

Проте дослідження також виявило існуючі виклики, які стоять на шляху до повноцінної інтеграції цих технологій. Серед них – висока вартість обладнання, недостатня технічна підготовка учителів, а також значний цифровий розрив, що ускладнює доступ до технологій для учнів у малих містах та сільській місцевості. Ці фактори створюють нерівні умови для учнів і обмежують потенціал використання новітніх технологій.

Висновки щодо гіпотез

1. Використання штучного інтелекту для індивідуалізації навчання у STEM-дисциплінах

значно підвищує академічні досягнення учнів, сприяючи розвитку критичного мислення та аналітичних навичок.

Висновок. Ця гіпотеза частково підтверджена. ІІІ дійсно дозволяє адаптувати навчальні матеріали під індивідуальні потреби учнів, що сприяє підвищенню ефективності навчання. Однак, ефективність ІІІ значною мірою залежить від технічної підготовки учителів та наявності відповідної інфраструктури. Без цих складових використання ІІІ може бути обмеженим, що впливає на загальний результат.

2. Інтеграція віртуальної та доповненої реальності в освітній процес сприяє глибшому розумінню складних наукових концепцій і підвищує мотивацію учнів до вивчення STEM-дисциплін.

Висновок. Ця гіпотеза підтверджена. Учителі закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО), які активно використовують VR та AR, відзначають, що учні стають більш залученими та мотивованими до вивчення предметів. Інтерактивність і візуалізація, яку пропонують ці технології, робить навчання більш захоплюючим і ефективним. Однак, варто враховувати, що широке впровадження VR та AR все ще стримується через високі витрати на обладнання та технічні складнощі.

Рекомендації для подальших досліджень. Дослідження має бути продовжене з метою вивчення довгострокових ефектів використання ІІІ та VR/AR у навчальному процесі. Важливо також зосередитися на розробці стратегій для подолання цифрового розриву та забезпечення рівного доступу до технологій для всіх учнів. Вивчення ефективності різних підходів до підвищення кваліфікації учителів також залишається пріоритетом, оскільки без належної підготовки інтеграція новітніх технологій може бути обмеженою.

Практичні рекомендації для впровадження STEM у навчальні процеси. Для того щоб технології ІІІ та VR/AR принесли максимальну користь у STEM-освіті, необхідно:

1. Освітні установи мають працювати над зменшенням цифрового розриву, надаючи учням у малих містах і селах доступ до Інтернету та сучасного обладнання.

2. Регулярні тренінги та семінари допоможуть учителям закладів загальної середньої освіти (ЗЗСО) освоїти новітні технології та інтегрувати їх у навчальний процес.

3. Використання ІІІ для індивідуалізації навчання та VR/AR для візуалізації складних концепцій має стати частиною повсякденної практики викладання.

4. Програми, які допомагають учням, що не мають доступу до цифрових технологій, будуть сприяти рівному доступу до якісної освіти.

Ці заходи дозволять створити більш рівноправні умови для навчання, підвищити ефективність освітнього процесу та підготувати учнів до майбутніх викликів у технологічному світі.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Kelley T. R., Knowles J. G. A conceptual framework for integrated STEM education. *International Journal of STEM Education*. 2016. 3(1). 11–19. doi: 10.1186/s40594-016-0046-z
2. Sanders M. STEM, STEM Education, STEMmania. *The Technology Teacher*, 2009. 68(4). 20–26.
3. Honey M., Pearson G., Schweingruber H. (Eds.). *STEM Integration in K-12 Education: Status, Prospects, and an Agenda for Research*. Washington, DC: The National Academies Press. 2014.
4. Поліхун Н. І., Постова К. Г., Сліпукхіна І. А., Онопченко Г. В., Онопченко О. В. Упровадження STEM-освіти в умовах інтеграції формальної і неформальної освіти обдарованих учнів: методичні рекомендації. Київ: Педагогічна думка. 2019.
5. Барна О. В., Балик Н. Р. Впровадження STEM-освіти у навчальних закладах: етапи та моделі. Київ: Інститут модернізації змісту освіти. 2017.
6. Олексюк О. Р. Елементи STEM-освіти у початковій школі. *Наукові записки. Серія: Педагогічні науки*. 2017. 1(167). 145–150.
7. Свид І. В., Чумак В. С., Бойко Н. В. Регіональний центр STEM-освіти технічного розвитку молоді (Doctoral dissertation, ДДМА). 2020.
8. Bybee R. W. Advancing STEM Education: A 2020 Vision. *Technology and Engineering Teacher*. 2010. 70(1). 30–35.
9. Becker K., Park K. Effects of integrative approaches among STEM subjects on students' learning: A preliminary meta-analysis. *Journal of STEM Education: Innovations and Research*. 2011. 12(5/6). 23–37.

REFERENCES:

1. Kelley, T. R., & Knowles, J. G. (2016). A conceptual framework for integrated STEM education. *International Journal of STEM Education*, 3(1), 11–19. doi:10.1186/s40594-016-0046-z.
2. Sanders, M. (2009). STEM, STEM Education, STEMmania. *The Technology Teacher*, 68(4), 20–26.
3. Honey, M., Pearson, G., & Schweingruber, H. (Eds.). (2014). *STEM Integration in K-12 Education: Status, Prospects, and an Agenda for Research*. Washington, DC: The National Academies Press.
4. Polikhun, N. I., Postova, K. H., Slipukhina, I. A., Onopchenko, H. V., & Onopchenko, O. V. (2019). Uprovadzhennia STEM-osvity v umovakh intehtatsii formal'noi i neformal'noi osvity obdarovanykh uchniv: metodychni rekomendatsii [Implementation of STEM education in conditions of integration of formal and informal education of gifted students: methodological recommendations]. Kyiv: Pedahohichna dumka [in Ukrainian].
5. Barna, O. V., & Balyk, N. R. (2017). Vprovadzhennia STEM-osvity u navchal'nykh zakladakh: etapy ta modeli [Implementation of STEM education in educational institutions: stages and models]. Kyiv: Instytut modernizatsii zmistu osvity [in Ukrainian].
6. Oleksiuk, O. R. (2017). Elementy STEM-osvity u pochatkovii shkoli [Elements of STEM education in elementary school]. *Naukovi zapysky. Serii: Pedahohichni nauky - Proceedings. Series: Pedagogical sciences*. 1(167), 145–150 [in Ukrainian].
7. Svyd, I. V., Chumak, V. S., & Boiko, N. V. (2020). Rehional'nyi tsentr STEM-osvity tekhnichnoho rozvytku molodi [Regional center of STEM education for technical development of youth]. Doctor's thesis, DDMA [in Ukrainian].
8. Bybee, R. W. (2010). Advancing STEM Education: A 2020 Vision. *Technology and Engineering Teacher*, 70(1), 30–35.
9. Becker, K., & Park, K. (2011). Effects of integrative approaches among STEM subjects on students' learning: A preliminary meta-analysis. *Journal of STEM Education: Innovations and Research*, 12(5/6), 23–37.

УДК 378.147:621.3

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-4>

Дмитро ІВАНЮК

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/0000-0003-0807-2140>

Олег ХИЖУН

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, завідувач відділу спектроскопії поверхні новітніх матеріалів, Інститут проблем матеріалознавства імені І.М. Францевича НАН України, вул. Крижановського, 3, м. Київ, Україна, 03142

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2403-8607>

SCOPUS-AUTHOR ID: 6701858609

Людмила ПІСКАЧ

кандидат хімічних наук, професор кафедри неорганічної та фізичної хімії факультету хімії та екології, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3117-4006>

SCOPUS-AUTHOR ID: 6603765788

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

Назар КЕВШИН

студент 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/0009-0009-9932-8447>

Бібліографічний опис статті: Іванюк, Д., Хижун, О., Піскач, Л., Кевшин, А., Кевшин, Н. (2024). Електронні та оптичні властивості почетвереного сульфиду Tl_2HgSnS_4 . *Фізика та освітні технології*, 2, 27–34, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-4>

ЕЛЕКТРОННІ ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЧЕТВЕРЕННОГО СУЛЬФІДУ Tl_2HgSnS_4

Серед цих почетверених халькогенідів особливий інтерес представляє сульфід талію, ртуті, олова Tl_2HgSnS_4 . Цей сульфід є унікальною почетвереною сполукою, яка існує в квазіпотрійній системі $Tl_2S-HgS-SnS_2$. Його нецентросиметрична тетрагональна структура ($I4_2m$) дозволяє припустити деяку перспективність використання Tl_2HgSnS_4 в нелінійній оптиці.

Атоми ртуті та олова мають чотири атоми сірки в найближчому оточенні. У структурі Tl_2HgSnS_4 атоми талію займають 4с позиції Вайкофа, атоми ртуті розташовані на 2b, атоми олова заповнюють 2a, а атоми сірки розташовані на 8i позиціях. У структурі Tl_2HgSnS_4 для атомів Tl характерне тетрагонально-антипризматичне оточення атомами S. Крім того, атоми талію, ртуті та олова утворюють тригональні призми в найближчому оточенні атомів сірки в структурі Tl_2HgSnS_4 .

Відомо, що знання електронних і оптичних властивостей, а також особливостей природи хімічного зв'язку в твердих тілах мають велике значення, оскільки дозволяють зрозуміти і передбачити їх фізико-хімічні властивості. В даній роботі ми провели поєднане теоретичне та експериментальне дослідження електронної структури

та оптичних властивостей Tl_2HgSnS_4 . Зокрема, ми дослідили рентгенівські фотоелектронні (XP) спектри внутрішніх (core level) та валентних електронів (VB), а також рентгенівську емісійну (XE) $S K\beta_{1,3}$ смугу (валентні S р стани) для кристала Tl_2HgSnS_4 , вироценого методом Бріджмена-Стокбаргера. Зокрема, в даному дослідженні ми розробили ефективний метод експериментального дослідження електронної структури кристалів методом рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (XPS), котрий дозволяє усувати наявність вуглеводневих домішок, що адсорбовані на поверхні кристалу. Щоб оцінити енергію забороненої зони кристалу Tl_2HgSnS_4 , був досліджений край оптичного поглинання при кімнатній температурі. Для перевірки експериментальних результатів проведені *ab initio* розрахунки краю оптичного поглинання сполуки Tl_2HgSnS_4 .

Ключові слова: електронні та оптичні властивості, електронна структура, атомні координати, край поглинання.

Dmytro IVANYUK

Graduate Student at 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/0000-0003-0807-2140>

Oleg KHYZHUN

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Head of the Department of Surface Spectroscopy of New Materials, Frantsevich Institute for Problems of Materials Science National Academy of Science of Ukraine, 3 Kryzhanovskoho Str., Kyiv, Ukraine, 03142

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2403-8607>

SCOPUS-AUTHOR ID: 6701858609

Lyudmyla PISKACH

Candidate of Chemical Sciences, Professor at the Department of Inorganic and Physical Chemistry of the Faculty of Chemistry and Ecology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3117-4006>

SCOPUS-AUTHOR ID: 6603765788

Andriy KEVSHYN

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at 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

Nazar KEVSHYN

Student at 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/0009-0009-9932-8447>

To cite this article: Ivanyuk, D., Khyzhun, O., Piskach, L., Kevshyn, A., Kevshyn, N. (2024). Elektronni ta optychni vlastyivosti pochetverennoho sulfidu Tl_2HgSnS_4 [Electronic and optical properties of quaternary sulfide Tl_2HgSnS_4]. *Physics and Educational Technology*, 2, 27–34, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-4>

ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF QUATERNARY SULFIDE Tl_2HgSnS_4

Among the sequaternary chalcogenides, thallium, mercury, tinsulfide Tl_2HgSnS_4 is of particular interest. This sulfide is a unique quaternary compound that exists in the quasi-ternary system Tl_2S - HgS - SnS_2 . Its non-centrosymmetric tetragonal structure (14_2m) suggests some promising use of Tl_2HgSnS_4 in nonlinear optics.

Mercury and tin atoms have four sulfur atoms in their immediate surroundings. In the Tl_2HgSnS_4 structure, thallium atoms occupy

4c Wyckoff positions, mercury atoms occupy 2b, tin atoms fill 2a, and sulfur atoms occupy 8i positions. In the $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ structure, Tl atoms are characterized by a tetragonal-antiprismatic surrounding by S atoms. In addition, thallium, mercury, and tin atoms form trigonal prisms in the immediate surroundings of sulfur atoms in the $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ structure.

It is known that knowledge of electronic and optical properties, as well as the features of the nature of chemical bonding in solids are of great importance, since it allows to understand and predict the physicochemical properties of the compounds. In this work, we have conducted a combined theoretical and experimental study of the electronic structure and optical properties of the $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ crystal. In particular, we have investigated the X-ray photoelectron (XP) spectra of core level and valence electrons (VB), as well as the X-ray emission (XE) $S\text{K}\beta_{1,3}$ band (valence Sp states) for the $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ crystal grown by the Bridgman-Stockbarger method. Particularly, in this study, we have developed an effective method for experimental studying the electronic structure of crystals by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), which allows eliminating the presence of hydrocarbon impurities adsorbed on the crystal surface. To estimate the band gap energy of the $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ crystal, the optical absorption edge at room temperature was investigated. To verify the experimental results, *ab initio* calculations of the optical absorption edge of the $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ compound were performed.

Key words: electronic and optical properties, electronic structure, atomic coordinates, absorption edge.

Актуальність проблеми. $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ є перспективним матеріалом завдяки своїм унікальним електронним та оптичним властивостям, що відкриває можливості для широкого спектра застосувань у сучасних технологіях. Електронні властивості $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ роблять його перспективною сполукою для різних практичних застосувань, таких як фотовольтаїка, оптоелектроніка та сенсори. Контрольоване легування та інженерія дефектів можуть значно покращити експлуатаційні характеристики $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$, розширюючи можливості використання в сучасних технологіях. Завдяки високому коефіцієнту поглинання у видимій та ближній інфрачервоній області спектру сульфід $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ є перспективним матеріалом для фотогоальванічних та фотодетекторних застосувань.

Мета дослідження – дослідити електронні та оптичні властивості почетвереного сульфиду $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$.

Виклад основного матеріалу. Для експериментального дослідження електронної структури $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ ми використовували кристал, синтезований з елементів високої чистоти ($\text{Pb}(99,99\%\text{ мас.})$, $\text{Sn}(99,99\%\text{ мас.})$, $\text{S}(99,999\%\text{ мас.})$) і HgS (отриманий з хімічних елементів, сірка та ртуть, обидва з чистотою 99,999% мас.), застосовуючи метод Бріджмена-Стокбаргера та дотримуючись методики, детально описаної в (Piskach, 2017). Для поточних вимірювань за допомогою методу рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (XPS) кристал $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ мав форму диска діаметром 6,2 мм і висотою 2,3 мм. XP-спектри внутрішніх електронів та валентної зони (VB) вимірювали за допомогою приладу UHV-Analysis-System (SPECS Surface Nano Analysis Company, Берлін, Німеччина). XP-спектри були отримані в камері з іонною відкачкою приладу UHV-Analysis-System, що працює

при залишковому тиску менше ніж 5×10^{-8} Па. Поверхню кристала $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ готували за методикою (Atuchin, 2016). XP-спектри збуджували джерелом рентгенівського випромінювання $\text{Mg K}\alpha$ ($h\nu = 1253,6$ eV) і реєстрували при постійній затримуючій енергії 28 eV. Спектр внутрішнього рівня $C 1s$, що формується вуглеводневими домішками, які адсорбовані на поверхні кристалу завдяки його контакту з оточуючою атмосферою, використовували як еталон задля врахування поверхневих ефектів заряджання. Енергію зв'язку (BE) внутрішнього рівня $C 1s$ від вуглеводних домішок покладали рівною 284,6 eV, як це зазвичай використовують у почетверених халькогенідах (Lavrentyev, 2015). Крім того, оскільки в почетверених халькогенідах $(\text{Cu}, \text{Ag})_2\text{B}^{\text{IV}}\text{C}^{\text{IV}}\text{Q}_4$, як показують експериментальні вимірювання та розрахунки зонної структури (Ocheretova, 2015, Lavrentyev, 2015), характерним є значний внесок валентних електронних станів Qp у всій енергетичному діапазоні валентної зони, ми дослідили також смугу XE $S\text{K}\beta_{1,3}$ (перехід $M_{\text{III}} \rightarrow K$), яка дає інформацію про енергетичний розподіл $S 3p$ станів у твердих тілах (Tarasova, 2012). Смугу XE $S\text{K}\beta_{1,3}$ збуджували рентгенівською трубкою БХВ-7 (золотий анод) за допомогою спектрографа ДРС-2М, оснащеного кристалом кварцу, сфокусованим за Йоганном (Tarasova, 2012, Atuchin, 2016). Умови роботи рентгенівської трубки БХВ-7: прискорююча анодна напруга $U_a = 46,0$ кВ; анодний струм, $I_a = 72,0$ мА. Енергетична роздільна здатність спектрографа була оцінена приблизно в 0,3 eV у поточних XE експериментах згідно з методикою (Atuchin, 2016). Вимірювання краю оптичного поглинання було проведено для кристала $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ у формі тонкої плоскопаралельної пластини товщиною 40 мкм за традиційною методикою, описаною в (Vu, 2018).

Для DFT розрахунків оптичного краю поглинання, ми використовували програмне забезпечення Quantum ESPRESSO (<https://www.quantum-espresso.org/>). В розрахунках параметри елементарної комірки $a = 7,8571 \text{ \AA}$ і $c = 6,6989 \text{ \AA}$ і положення атомів (табл. 1) у досліджуваній сполуці покладали такими, як вони були встановлені для почотвереного сульфиду $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ у (Piskach, 2017).

Таблиця 1

Атомні координати сполуки $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$, які використовуються в поточних DFT розрахунках оптичного коефіцієнта поглинання ($a = 7,8571 \text{ \AA}$ та $c = 6,6989 \text{ \AA}$ (Piskach, 2017))

Атом	Позиції Вайкофа	x/a	y/b	z/c
Ti	4c	1/2	0	1/2
Hg	2b	0	0	1/2
Sn	2a	0	0	0
S	8i	0.1660	X	0.251

На рис. 1 представлено ХР-спектри кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$, що були досліджені для вихідної поверхні, а також після її чищення алмазним скребком у камері спектрометра. Видно, що оглядовий ХР-спектр вихідної поверхні досліджуваного кристалу не містить якихось додаткових хімічних елементів, окрім складових компонентів. Винятком є ХР-спектри внутрішніх C(O) 1s електронів від вуглеводневих та кисеньвмісних домішок.

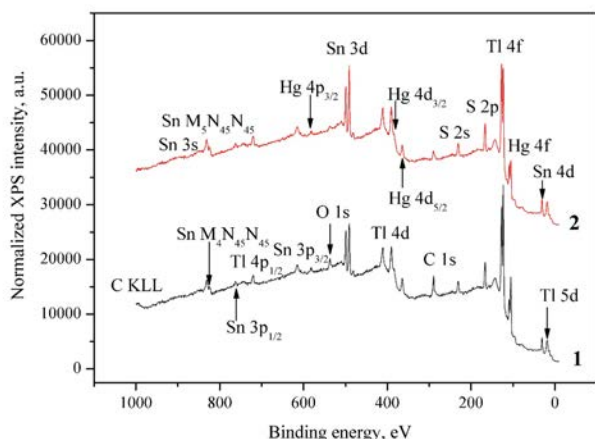


Рис. 1. Оглядні ХР-спектри кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$: (1) вихідна поверхня, (2) після чищення алмазним скребком в камері спектрометра

Відомо, що ХР-спектроскопія є надзвичайно важливим експериментальним методом, який дозволяє отримувати вичерпну інформацію про наявність хімічних

елементів у досліджуваній сполуці, особливостях хімічного зв'язку, а також про енергетичний розподіл електронних станів у валентній зоні. Однак метод ХР-спектроскопії є дуже чутливим методом до наявності адсорбованих на поверхні вуглеводневих та кисеньвмісних домішок. Наявність останніх обумовлена взаємодією поверхні кристалу з навколишньою атмосферою. Під час ХР-досліджень для усунення впливу вуглеводневих та кисеньвмісних домішок на форму і енергетичне положення максимумів ХР-спектрів часто застосовують опромінення іонами Ar^+ з енергією 1,5–3,0 кеВ. Правда, такий метод часто призводить до суттєвої зміни стехіометрії досліджуваних сполук в межах приповерхневого шару, що аналізується методом ХР-спектроскопії.

Як видно з рис. 1, відносні інтенсивності ХР-спектрів внутрішніх C(O) 1s електронів від вуглеводневих та кисеньвмісних домішок для вихідної поверхні кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ не досить суттєві, але їх наявність добре значні, але добре реєструються методом ХР-спектроскопії. Після *in situ* чищення поверхні кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ алмазним скребком, відносна інтенсивність ХР-спектру внутрішніх C 1s електронів від вуглеводневих домішок суттєво знижується, а ХР-спектр внутрішніх O 1s електронів від кисеньвмісних домішок практично не реєструється (рис. 2). Це свідчить про те, що запропонований нами метод усунення вуглеводневих та кисеньвмісних домішок, адсорбованих на поверхні кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ в результаті її контакту з навколишньою атмосферою є досить ефективним для отримання ХР-спектрів сполуки $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$.

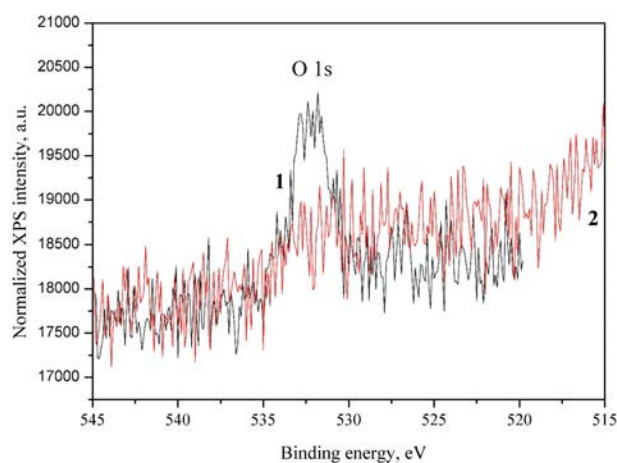


Рис. 2. ХР-спектр внутрішніх O 1s електронів від кисеньвмісних домішок, адсорбованих на поверхні кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ у випадку вихідної поверхні (1) та після її чищення алмазним скребком у камері спектрометра (2)

Результати дослідження найбільш інформативних ХР спектрів внутрішніх електронів складових хімічних елементів досліджуваного кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ у випадку вихідної поверхні та після її чищення алмазним скребком у камері спектрометра представлені на рис. 3, значення

енергій зв'язку наведені в таблиці 2. Видно, що енергії зв'язку ХР спектрів внутрішніх електронів складових атомів у випадку дослідження вихідної поверхні кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ збігаються в межах похибки вимірювань з такими, що отримані після *in situ* чищення поверхні алмазним скребком.

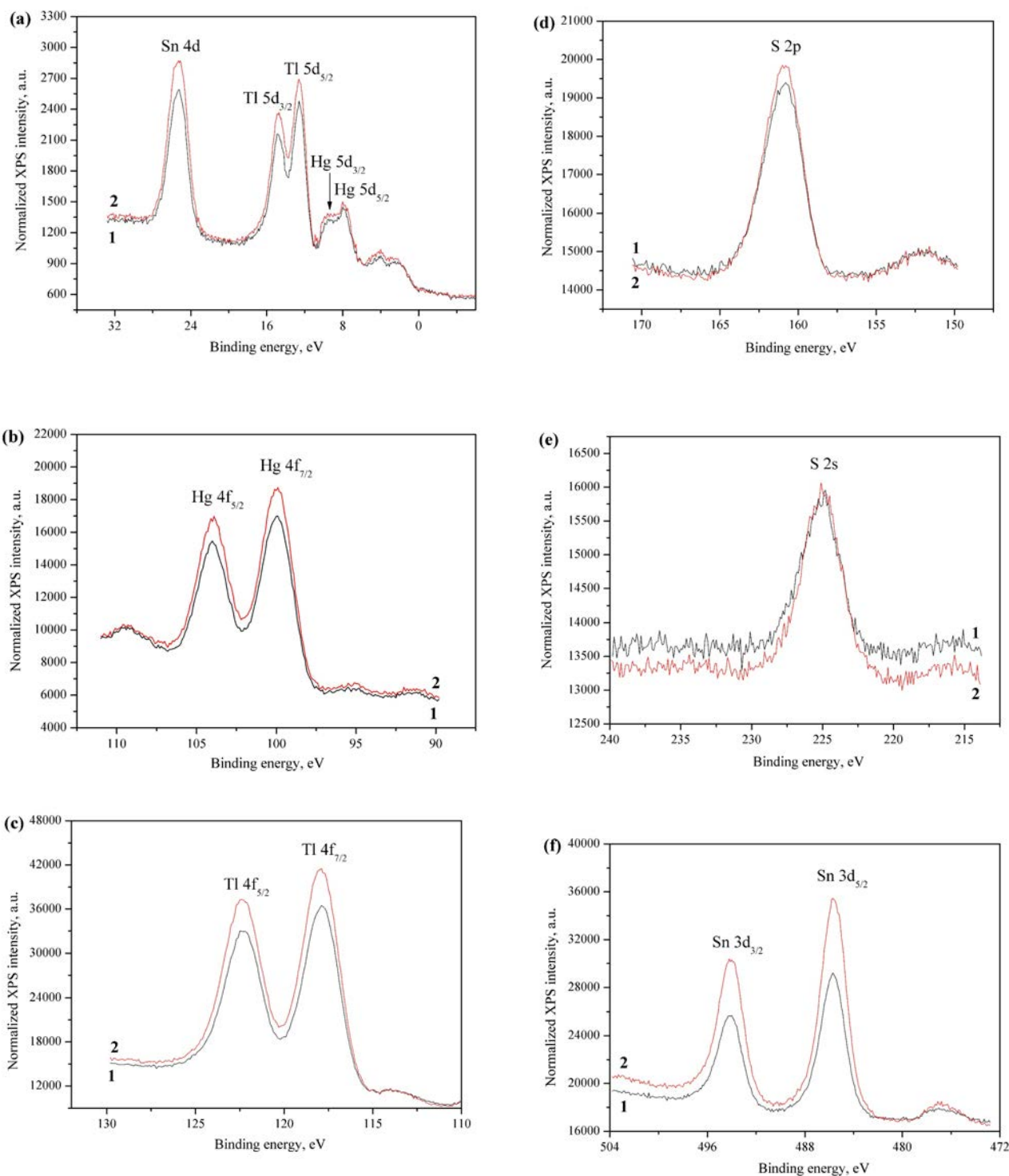


Рис. 3. ХР-спектри внутрішніх електронів кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$, досліджених для вихідної поверхні (1) та після її чищення алмазним скребком в камері спектрометра (2): (a) VB, (b) Hg 4f, (c) Tl 4f, (d) S 2p, (e) S 2s і (f) Sn 3d

Таблиця 2

Енергії зв'язку (в еВ*) внутрішніх електронів складових хімічних елементів досліджуваного кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$

Рівень внутрішніх електронів	Вихідна поверхня кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$	Кристал $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ після чищення поверхні алмазним скребком у камері спектрометра
Ti $5d_{5/2}$	12.66	12.73
Ti $5d_{3/2}$	14.79	14.86
Sn 4d	25.42	25.37
Hg $4f_{7/2}$	100.07	100.01
Hg $4f_{5/2}$	103.98	104.04
Ti $4f_{7/2}$	117.88	118.93
Ti $4f_{5/2}$	122.39	122.36
S 2p	161.11	161.14
S 2s	225.22	225.16
Sn $3d_{5/2}$	485.68	485.72
Sn $3d_{3/2}$	494.27	494.21

Примітка: * похибка вимірювань: ± 0.08 еВ.

Варто зазначити, що виходячи з умови нейтральності заряду кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$, його атомний склад можна записати як $(\text{Ti}^+)_2\text{Hg}^{2+}\text{Sn}^{4+}(\text{S}^{2-})_4$. Тим не менш, порівнюючи величини енергій зв'язку ХР спектрів внутрішніх електронів складових атомів у випадку кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ з літературними даними (Briggs, 1990), можна стверджувати, що зарядові стани атомів талію, ртуті та олова в даному кристалі менші, ніж очікувані +1, +2 і +4, відповідно. Ці експериментальні дані можна пояснити, якщо припустити, що ковалентна складова хімічного зв'язку (на додаток до іонної частини) є досить суттєвою в кристалі $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$.

На рис. 4 представлено суміщення в єдиній енергетичній шкалі ХР спектру валентних електронів (VB) та рентгенівської емісійної $\text{S K}\beta_{1,3}$ смуги, що відображає енергетичний розподіл $\text{S } 3p$ електронних станів, котрі досліджені для кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$. Видно, що основний внесок $\text{S } 3p$ електронних станів у досліджуваному кристалі спостерігається у верхній частині валентної зони.

На рис. 5 представлено спектральну залежність коефіцієнта поглинання світла. Враховуючи значення енергії квантів світла в області краю поглинання 300 см^{-1} , ми оцінили ширину забороненої зони, яка дорівнює 1.82 еВ при $T=300 \text{ К}$. В області краю смуги власного поглинання частотна залежність коефіцієнта поглинання добре описується експоненціальною

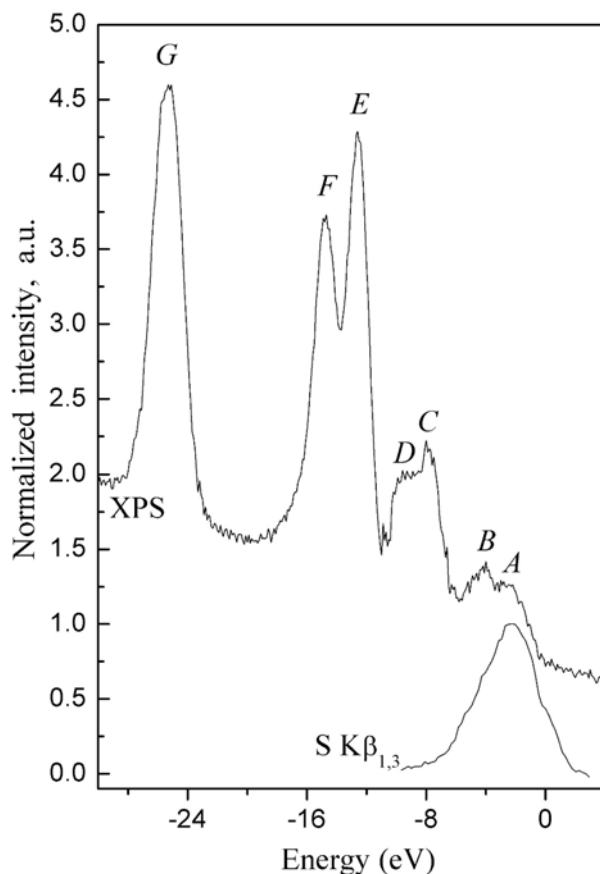


Рис. 4. Суміщення в єдиній енергетичній шкалі ХР спектра валентних електронів та рентгенівської емісійної $\text{S K}\beta_{1,3}$ смуги кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$

залежністю. Це вказує на те, що оптичні переходи в цій області утворюються за участі хвостів щільності станів, прилеглих до країв дозволив смуг.

Розрахований коефіцієнт оптичного поглинання $\alpha(\omega)$ сполуки $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$ представлено на рис. 6. Видно, що розрахований край оптичного поглинання починається при енергіях фотонів близько 1.67 еВ . Це значення трохи менше експериментального значення E_g кристалу $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$. Занижене значення теоретичної енергетичної щільності у порівнянні з експериментальним значенням можна пояснити тим, що при розрахунках в якості обмінно-енергетичного потенціалу ми використовували наближення узагальненої градієнтної апроксимації (Perdew, 1996), котре зазвичай дає менші величини енергетичних щільностей в напівпровідниках і діелектриках. З рис. 6 видно, що при енергіях більших за 1.67 еВ , інтенсивність теоретичного

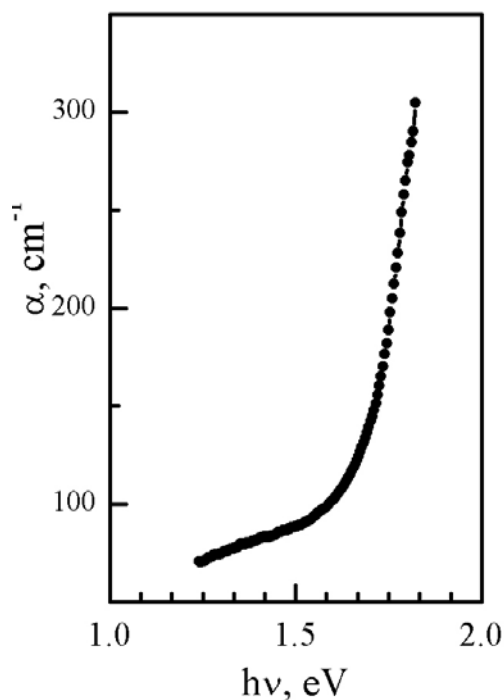


Рис. 5. Спектральний розподіл коефіцієнта поглинання кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ при 300 K

коефіцієнта поглинання стрімко зростає зі збільшенням енергії фотонів.

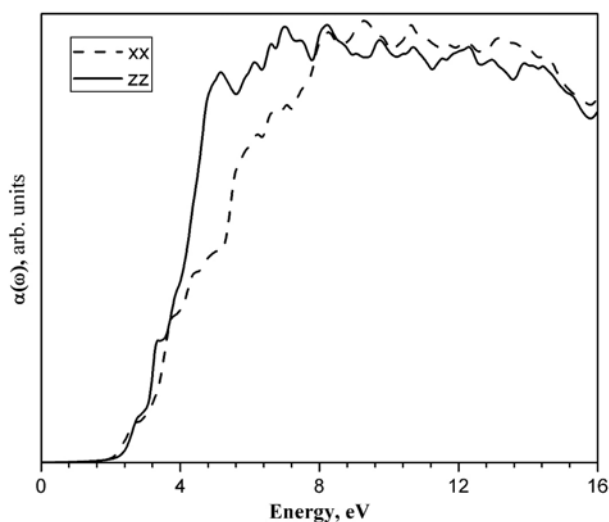


Рис. 6. Дисперсія коефіцієнта поглинання $\alpha(\omega)$ $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$

Висновки. Проведено експериментальні та теоретичні дослідження електронно-зонної структури та оптичних властивостей сполуки $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ – перспективного напівпровідника для застосування в оптоелектроніці. Вимірювання кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$, вирощеного методом

Бріджмена-Стокбаргера, вказує на його високу оптичну якість. Оглядовий ХР-спектр вихідної поверхні досліджуваного кристалу не виявляє присутності якихось додаткових хімічних елементів, окрім складових компонентів. Винятком є ХР-спектри внутрішніх $\text{C}(\text{O})$ $1s$ електронів від вуглеводневих та кисеньвмісних домішок. Наявність останніх обумовлена взаємодією поверхні кристалу з навколишньою атмосферою.

В даній роботі було запропоновано *in situ* чищення поверхні кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ алмазним скребком. В результаті такого чищення, ХР-спектр внутрішніх $\text{O } 1s$ електронів від кисеньвмісних домішок практично не реєструється. Енергії зв'язку ХР-спектрів внутрішніх електронів складових атомів у випадку дослідження вихідної поверхні кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ збігаються в межах похибки вимірювань з такими, що отримані після *in situ* чищення поверхні алмазним скребком. Цей метод не призводить до зміни стехіометрії досліджуваної сполуки. Це свідчить про те, що запропонований нами метод усунення вуглеводневих та кисеньвмісних домішок, адсорбованих на поверхні кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ в результаті її контакту з навколишньою атмосферою, є досить ефективним для отримання ХР спектрів сполуки $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$.

Суміщення в єдиній енергетичній шкалі ХР спектру валентних електронів та рентгенівської емісійної $\text{S K}\beta_{1,3}$ смуги, що відображає енергетичний розподіл $\text{S } 3p$ електронних станів, свідчать про те, що основний внесок $\text{S } 3p$ електронних станів у досліджуваному кристалі спостерігається у верхній частині валентної зони.

Було досліджено спектральний розподіл коефіцієнта поглинання для кристалу $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$. Показано, що ширина забороненої зони дорівнює 1,82 eV при кімнатній температурі. Розрахований край оптичного поглинання починається при енергіях фотонів близько 1,67 eV. Занижене значення теоретичної енергетичної щільності у порівнянні з експериментальним значенням можна пояснити тим, що при розрахунках в якості обмінно-енергетичного потенціалу ми використовували наближення узагальненої градієнтної апроксимації, котре зазвичай дає менші величини енергетичних щілин в напівпровідниках і діелектриках. Отримані результати свідчать, що $\text{Tl}_2\text{HgSnS}_4$ є перспективним матеріалом для використання в оптоелектронних пристроях.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Piskach L. V., Mozolyuk M. Yu, Fedorchuk A.O., et al. Phase equilibria in the $\text{Ti}_2\text{S}-\text{HgS}-\text{SnS}_2$ system at 520 K and crystal structure of $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$. Chem. Met. Alloys, 2017. P. 136–141.
2. Atuchin V. V., Galashov E. N., Khyzhun O. Y., Bekenev V. L., Pokrovsky L. D., Borovlev Y. A., Zhdankov V. N. Low Thermal Gradient Czochralski growth of large CdWO_4 crystals and electronic properties of (010) cleaved surface. J. Solid State Chem, 2016. V. 236. P. 24–31.
3. Lavrentyev A. A., Gabrelian B. V., Vu V. T., Shkumat P. N., Ocheretova V. A., Parasyuk O. V., O. Y. Khyzhun. Electronic structure and optical properties of $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$: DFT calculations and X-ray spectroscopy measurements. Opt. Mater., 2015. V. 47. P. 435–444
4. Ocheretova V. A., Parasyuk O. V., Fedorchuk A. O., Khyzhun O. Y. Electronic structure of $\text{Cu}_2\text{CdGeSe}_4$ single crystalas determined from X-ray spectroscopy data. Mater. Chem. Phys., 2015. V. 160. P. 345–351.
5. Tarasova A. Y., Isaenko L. I., Kesler V. G., Pashkov V. M., Yelisseyev A. P., Denysyuk N. M., Khyzhun O. Y. Electronic structure and fundamental absorption edges of KPb_2Br_5 , $\text{K}_{0.5}\text{Rb}_{0.5}\text{Pb}_2\text{Br}_5$ and RbPb_2Br_5 single crystals. J. Phys. Chem. Solids, 2012. V. 73. P. 674–682.
6. Vu T. V., Lavrentyev A. A., Gabrelian B. V., Ocheretova V. A., Parasyuk O. V., Khyzhun O. Y. Electronic band-structure and optical constants of Pb_2GeS_4 : Abinitio calculations and X-ray spectroscopy experiments. J. Mater. Sci.: Mater. Electron., 2018. V. 29, P. 16088–16100.
7. Briggs, D. Seach P.M. Practical Surface Analysis (2nd Ed.): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy, John Willey & Sons Ltd., Chichester, 1990.
8. Perdew J. P., Burke S., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77, P. 3865–3868.

REFERENCES:

1. Piskach, L. V., Mozolyuk, M. Yu, Fedorchuk, A.O., et al. (2017). Phase equilibria in the $\text{Ti}_2\text{S}-\text{HgS}-\text{SnS}_2$ system at 520 K and crystals tructure of $\text{Ti}_2\text{HgSnS}_4$. Chem. Met. Alloys, P. 136–141.
2. Atuchin, V. V., Galashov, E. N., Khyzhun, O. Y., Bekenev, V. L., Pokrovsky, L. D., Borovlev, Y. A., & Zhdankov, V. N. (2016). Low Thermal Gradient Czochralski growth of large CdWO_4 crystals and electronic properties of (010) cleaved surface. J. Solid State Chem, V. 236. P. 24–31.
3. Lavrentyev, A. A., Gabrelian, B. V., Vu, V. T., Shkumat, P. N., Ocheretova, V. A., Parasyuk, O. V., & Khyzhun, O. Y. (2015). Electronic structure and optical properties of $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$: DFT calculations and X-ray spectroscopy measurements. Opt. Mater., V. 47. P. 435–444.
4. Ocheretova, V. A., Parasyuk, O. V., Fedorchuk, A. O., Khyzhun, O. Y. (2015). Electronic structure of $\text{Cu}_2\text{CdGeSe}_4$ single crystalas determined from X-ray spectroscopy data. Mater. Chem. Phys., V. 160. P. 345–351.
5. Tarasova, A. Y., Isaenko, L. I., Kesler, V. G., Pashkov, V. M., Yelisseyev, A. P., Denysyuk, N. M., & Khyzhun, O. Y. (2012). Electronic structure and fundamental absorption edges of KPb_2Br_5 , $\text{K}_{0.5}\text{Rb}_{0.5}\text{Pb}_2\text{Br}_5$ and RbPb_2Br_5 single crystals. J. Phys. Chem. Solids, V. 73. P. 674–682.
6. Vu, T. V., Lavrentyev, A. A., Gabrelian, B. V., Ocheretova, V. A., Parasyuk, O. V., & Khyzhun, O. Y. (2018). Electronic band-structure and optical constants of Pb_2GeS_4 : Abinitio calculations and X-ray spectroscopy experiments. J. Mater. Sci.: Mater. Electron., V. 29, P. 16088–16100.
7. Briggs, D., & Seach, P.M. (1990). Practical Surface Analysis (2nd Ed.): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy, John Willey & Sons Ltd., Chichester,
8. Perdew, J. P., Burke, S., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. Phys. Rev. Lett. V. 77, P. 3865–3868.

УДК 621.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-5>

Максим КИРИЧЕНКО

аспірант навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

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

Бібліографічний опис статті: Кириченко, М., МIRONCHUK, Г. (2024). Оптичні та нелінійно-оптичні властивості стекол системи $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ *Фізика та освітні технології*, 2, 35–39, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-5>

ОПТИЧНІ ТА НЕЛІНІЙНО-ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СТЕКОЛ СИСТЕМИ $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$

Халькогенідні стекла, леговані рідкоземельними іонами, привернули значну увагу дослідників завдяки їх широкому використанню в оптоелектроніці, зокрема в лазерах, які працюють в середньому інфрачервоному діапазоні. При цьому, є можливість змінювати параметри таких лазерів шляхом зміни хімічного складу вихідного матеріалу. Однією з найбільш перспективних домішок в халькогенідних стеклах є Ербій, що пов'язано з його властивістю ефективно випромінювати кванти електромагнітних хвиль на стандартній телекомунікаційній довжині хвилі 1540 нм. Передбачити властивості стекол з використанням тільки теорії процесів поглинання та випромінювання світла практично неможливо, тому дослідження впливу домішок Er^{3+} на оптичні властивості халькогенідних стекол лежить у експериментальній площині.

Область застосувань досліджуваних матеріалів в оптоелектроніці пов'язана з шириною забороненої зони. Для оцінки оптичної ширини забороненої зони було проведено дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання в області краю смуги власного поглинання. Оцінено ширину забороненої зони. Встановлено, що у міру збільшення молярної частки As_2S_3 в досліджуваних стеклах системи $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ край поглинання зміщується в довгохвильову область, що відображає зменшення оптичної щільності. Зменшення ширини забороненої зони при збільшенні молярної частки As_2S_3 пояснюється тим, що As_2S_3 має ширину забороненої зони меншу, ніж схопоподібний дисульфід германію.

Проведено дослідження генерації другої та третьої гармоніки. Досягнуті параметри нелінійно-оптичних ефектів третього порядку, дають змогу прогнозувати широке застосування досліджуваних стекол як матеріалів для нелінійно-оптичного перетворення ГЧ лазерних променів, що має вирішальне значення для інфрачервоних лідарних систем (світлові далекоміри). Співіснування фотоіндукованої генерації другої гармоніки та генерації третьої гармоніки (отриманої без лазерної стимуляції) відкриває можливість для застосування досліджуваних стекол в оптоелектронних пристроях, які працюють одночасно на подвоєних та потроєних частотних сигналах.

Ключові слова: халькогенідні стекла, оптичні властивості, нелінійно-оптичні властивості.

Maxym KYRYCHENKO

Graduate Student, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

Galya 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

To cite this article: Kyrychenko, M., Myronchuk, G. (2024). Optychni ta neliniyno-optychni vlastyvyosti stekol systemy $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ [Optical and nonlinear optical properties glasses of the $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ system]. *Physics and Educational Technology*, 2, 35–39, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-5>

OPTICAL AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES GLASSES OF THE $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ SYSTEM

Chalcogenide glasses doped with rare earth ions have attracted considerable attention of researchers due to their widespread use in optoelectronics, in particular in lasers operating in the mid-infrared range. At the same time, it is possible to change the parameters of such lasers by changing the chemical composition of the source material. One of the most promising impurities in chalcogenide glasses is Erbium, which is due to its ability to efficiently emit quanta of electromagnetic waves at the standard telecommunication wavelength of 1540 nm. It is practically impossible to predict the properties of glasses using only the theory of the processes of absorption and emission of light, so the study of the effect of Er^{3+} impurities on the optical properties of chalcogenide glasses lies in the experimental plane.

The scope of applications of the studied materials in optoelectronics is related to the width of the band gap. To estimate the optical band gap, a study of the spectral distribution of the absorption coefficient in the region of the edge of the intrinsic absorption band was conducted. The width of the forbidden optical band gap is estimated. It was established that as the molar fraction of As_2S_3 in the studied glasses of the $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ system increases, the absorption edge shifts to the long-wavelength region, which reflects the reduction of the optical band gap. The decrease in the band gap with an increase in the molar fraction of As_2S_3 is due to the fact that As_2S_3 has a smaller band gap than glassy germanium disulfide.

The study of the generation of the second and third harmonics was conducted. The achieved parameters of nonlinear optical effects of the third order make it possible to predict the wide application of the studied glasses as materials for nonlinear optical conversion of IR laser beams, which is of crucial importance for IR lidar systems (light rangefinders). The coexistence of the photoinduced generation of the second harmonic and the generation of the third harmonic (obtained without laser stimulation) opens up the possibility of using the studied glasses in optoelectronic devices that operate simultaneously on doubled and tripled frequency signals.

Key words: chalcogenide glasses, optical properties, nonlinear optical properties.

Вступ. Халькогенідні стекла, леговані рідкоземельними іонами, привернули значну увагу дослідників завдяки їх широкому використанню в лазерах, що працюють в середньому інфрачервоному діапазоні. Ці лазери широко застосовуються в медичній хірургії, військовій техніці, безпечному для очей лазерному радарі, при моніторингу забруднення атмосфери, дистанційному зондуванні та (Eggleton, Luther-Davies, Richardson, 2011, pp. 141–148; Zakery, Elliott, 2003, pp. 1–12; Han, 2016, pp. 201–210; Demetriou, 2016, pp. 6350–6358). Волоконні лазери, що працюють в середній інфрачервоній довжині хвилі, можуть бути отримані за допомогою різних іонів рідкоземельних іонів, таких як Dy^{3+} , Ho^{3+} , Pr^{3+} , Tm^{3+} і Er^{3+} (Tian, Xu, Hu, Zhang, 2011, pp. 3218–3220; Yang, 2011, pp. 26529–26535; Karaksina, 2016, pp. 275–279). При цьому, є можливість змінювати параметри таких лазерів шляхом зміни хімічного складу вихідного матеріалу (Rizak, Rizak, Semak, 2001, pp. 152). Однією з найбільш перспективних домішок в халькогенідних стеклах є Ербій, що пов'язано з його властивістю ефективно випромінювати кванти певних електромагнітних хвиль під дією збуджуючих чинників на стандартній телекомунікаційній довжині хвилі 1540 нм.

Передбачити властивості стекл з використанням тільки теорії процесів поглинання та випромінювання світла практично неможливо, тому дослідження впливу домішок Er^{3+}

на оптичні властивості халькогенідних стекл лежить у експериментальній площині.

Мета роботи. Дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання та генерації другої та третьої гармоніки стекл систем $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ з різним співвідношенням елементів GeS_2 , As_2S_3 та Er_2S_3 .

Експериментальні результати та їх обговорення. Синтез склоподібних сплавів проводили з елементарних компонентів та попередньо синтезованого сульфиду As_2S_3 у вакуумованих до залишкового тиску (10^{-2} Па) кварцових ампулах. Загальна маса вихідної шихти для синтезу становила 1 г.

Отримання склоподібних сплавів проводили у печі шахтного типу СШОЛ за такою методикою: нагрів до температури 350°C (швидкість $30^\circ\text{C}/\text{год}$), витримка 24 години; нагрів до температури 500°C (швидкість $6^\circ\text{C}/\text{год}$), витримка 10 години; охолодження синтезованих сплавів у режимі виключеної печі.

Склоподібна структура синтезованих сплавів контролювалася рентгенофазовим аналізом (ДРОН 4-13, CuK_α -випромінювання). Наявність характерних «галло» (рис. 1) свідчить про їх аморфний стан.

Область застосувань досліджуваних матеріалів в оптоелектроніці пов'язана з шириною забороненої зони. Для оцінки оптичної ширини забороненої зони було проведено дослідження спектрального розподілу коефіцієнта

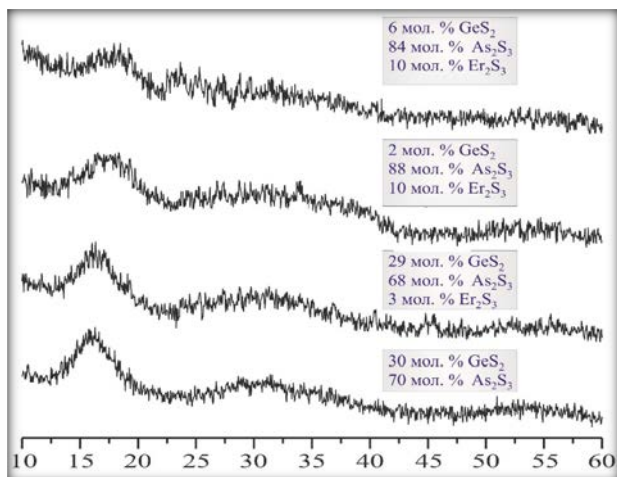


Рис. 1. Рентгенограми склоподібних зразків

поглинання в області краю смуги власного поглинання. Для проведення вимірювань використовувались пластини з плоскопаралельними поверхнями оптичної якості, товщиною 0,06-0,1 мм. У якості спектрального приладу використовувався дифракційний монохроматор МДР – 206 з кремнієвим фотодіодом для діапазону 360-1100 нм (спектральний дозвіл 0,2 нм). Після аналого-цифрового перетворювача, сигнал аналізували за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення «Монохроматор» (Ломо Фотоніка). Дослідження коефіцієнта відбивання проводилось при кімнатній температурі за допомогою спектрофотометра Cary 5000 UV-Vis-NIR Spectrophotometer (Agilent Technologies) у спектральному діапазоні 400-1500 нм з точністю $\pm 0,1$ нм (UV-Vis.). Отримані спектральні залежності коефіцієнта поглинання $\alpha(h\nu)$ для різних складів наведені на рис. 2.

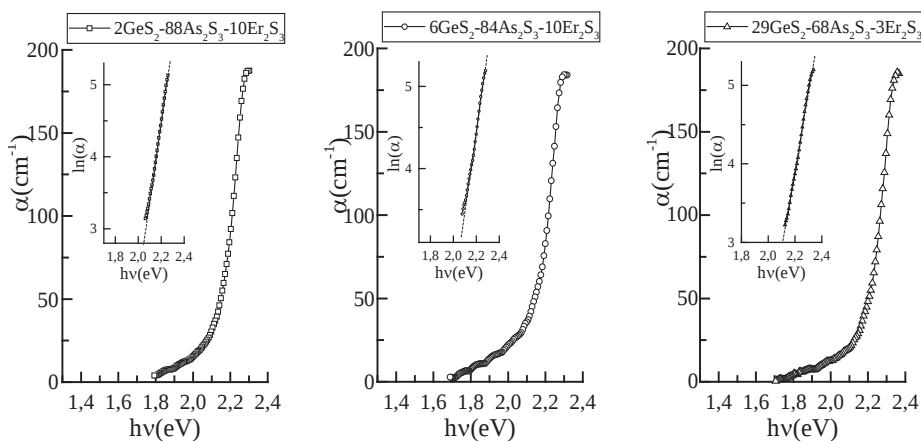


Рис. 2. Спектральний розподіл коефіцієнта поглинання

Для оцінки ширини забороненої зони ми не могли використати метод Тауца, який потребує значень коефіцієнта поглинання $\sim 10^3$ cm^{-1} . Наближене значення E_g розраховувалось на рівні $\alpha = 10^3$ cm^{-1} : $E_g = E_{100} + E_U \ln(\alpha / 100)$, де E_{100} – значення енергії фотона на рівні $\alpha = 100$ cm^{-1} , E_U – характеристична енергія Урбаха, яка, з експериментальних результатів визначена як $E_U = \Delta(h\nu) / \Delta(\ln \alpha)$. Різниця в оцінці ширини забороненої зони обома методами, згідно літературних даних, складає 3–7%. Результати оцінки ширини забороненої зони представлено в таблиці 1.

Таблиця 1

Оцінка ширини забороненої зони

Склад зразка, мол. %			E_U , меВ	E_{100} , еВ	E_g , еВ
2 GeS ₂	88 As ₂ S ₃	10 Er ₂ S ₃	87	2,21	2,41
6 GeS ₂	84 As ₂ S ₃	10 Er ₂ S ₃	91	2,22	2,43
29 GeS ₂	68 As ₂ S ₃	3 Er ₂ S ₃	89	2,27	2,48

У міру збільшення молярної частки As₂S₃ в досліджуваних стеклах системи GeS₂-As₂S₃-Er₂S₃ край поглинання зміщується в довгохвильову область (рис. 2), що відображає зменшення оптичної щільності (табл. 1). Зменшення ширини забороненої зони при збільшенні молярної частки As₂S₃ пояснюється тим, що As₂S₃ має ширину забороненої зони ($E_g = 2,2$ еВ) меншу, ніж склоподібний дисульфід германію ($E_g = 3,1$ еВ).

Для дослідження генерації другої гармоніки в стеклах досліджуваної системи просторова нецентросиметричність заряду, досягалась за допомогою обробки двома просторовими когерентними лазерними

променями – фундаментальної та подвоєної частоти Nd:YAG наносекундного імпульсного лазера з довжиною хвилі 1064 нм, що сприяло поляризації середовища (Driscoll, Lawandy, 1994, pp. 355–371; Kityk, Majchrowski, 2004, pp. 33–37). Опромінення зразків випромінюванням з двома різними довжинами хвиль тривало близько 3–4 хв. Вимірювання проводилось з використанням інтерференційного фільтра з довжиною хвилі 532 нм. При дослідженні генерації третьої гармоніки фото індукована обробка не здійснювалась, а інтерференційний фільтр було замінено на 355 нм. Результати вимірювань генерації другої та третьої гармоніки представлені на рис. 3, 4.

Створення нелінійності другого порядку в стеклах відкриває можливість виробництва дешевих активних або пасивних компонентів, таких як електрооптичні модулятори або перемикачі. Досягнуті параметри нелінійно-оптичних ефектів третього порядку, дають змогу прогнозувати широке застосування досліджуваних стеклов як матеріалів для нелінійно-оптичного перетворення ІЧ лазерних променів, що має вирішальне значення для ІЧ лідарних систем (світлові далекоміри). Співіснування фотоіндукованої генерації другої гармоніки та генерації третьої гармоніки (отриманої без лазерної стимуляції) відкриває можливість для застосування досліджуваних стеклов в оптоелектронних пристроях, які працюють одночасно на подвоєних та потроєних частотних сигналах. Потрібно зазначити, що впродовж кількакратної ІЧ-індукованої обробки, спостережувані фотоіндуковані зміни були повністю зворотними, що підтверджує їхній високий потенціал відтворення.

Висновки. В роботі проведено дослідження оптичних та нелінійно-оптичних параметрів стеклов систем $\text{GeS}_2\text{-As}_2\text{S}_3\text{-Er}_2\text{S}_3$ з різним співвідношенням елементів GeS_2 , As_2S_3 та Er_2S_3 .

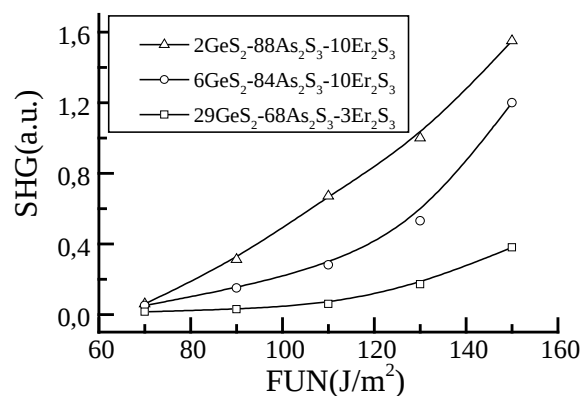


Рис. 3. Залежність інтенсивності генерації другої гармоніки від густини енергії фундаментального лазерного променя

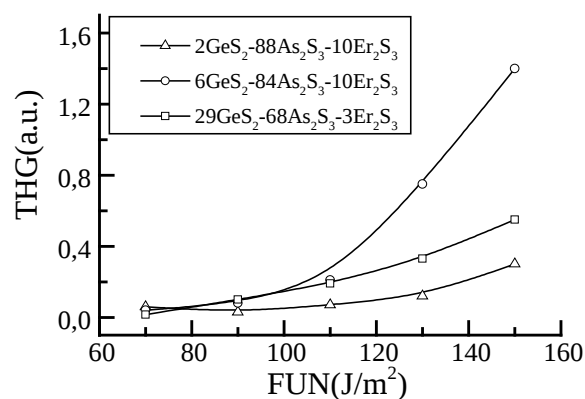


Рис. 4. Залежність інтенсивності генерації третьої гармоніки від густини енергії фундаментального лазерного променя

Оцінено ширину забороненої зони. Встановлено, що, у міру збільшення молярної частки As_2S_3 край поглинання зміщується в довгохвильову область. Співіснування фотоіндукованої генерації другої гармоніки та генерації третьої гармоніки (отриманої без лазерної стимуляції) відкриває можливість для застосування досліджуваних стеклов в оптоелектронних пристроях, які працюють одночасно на подвоєних та потроєних частотних сигналах.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Eggleton B. J., Luther-Davies B., Richardson K. Chalcogenide photonics. *Nature Photonics* 2011. Vol. 5, 141–148.
2. Zakery A., Elliott S. R. Optical properties and applications of chalcogenide glasses: a review. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2003. Vol. 330. 1–12.
3. Han Z. et al. On-chip mid-infrared gas detection using chalcogenide glass waveguide. *Applied Physics Letters*. 2016. Vol.108. 201–210.
4. Demetriou G. et al. Refractive index and dispersion control of ultrafast laser inscribed waveguides in gallium lanthanum sulphide for near and mid-infrared applications. *Optics Express*. 2016. Vol. 24. 6350–6358.
5. Tian Y., Xu R., Hu L., Zhang J. Intense 2.7 μm and broadband 2.0 μm emission from diode-pumped $\text{Er}^{3+}/\text{Tm}^{3+}/\text{Ho}^{3+}$ -doped fluorophosphate glass. *Optics Letters*. 2011. Vol. 36. 3218–3220.

6. Yang S. et al. Broadband near-infrared emission in Tm^{3+} - Dy^{3+} codoped amorphous chalcogenide films fabricated by pulsed laser deposition. *Optics Express*. 2011. Vol. 19. 26529–26535.
7. Karaksina E. V. et al. Preparation of high-purity Pr^{3+} doped Ge-As-Se-In-I glasses for active mid-infrared optics. *Journal of Luminescence*. 2016. Vol. 177. 275–279.
8. Різак В. М., Різак І. М., Семак Д. Г. Функціональні халькогенідні напівпровідники: Монографія. Ужгород: Закарпаття. 2001. 152 с.
9. Driscoll T. J., Lawandy N. M. Optically encoded second-harmonic generation in bulk silica-based glasses. *Journal of the Optical Society of America B*. 1994. Vol. 11. P. 355–371.
10. Kityk I. V., Majchrowski A. Second-order non-linear optical effects in BiB_3O_6 glass fibers. *Optical Materials*. 2004. Vol. 25. P. 33–37.

REFERENCES:

1. Eggleton, B. J., Luther-Davies, B., & Richardson, K. Chalcogenide photonics. *Nature Photonics*, (2011). Vol. 5, 141–148.
2. Zakery, A., & Elliott, S. R. (2003). Optical properties and applications of chalcogenide glasses: a review. *Journal of Non-Crystalline Solids*. Vol. 330. 1–12.
3. Han, Z. et al. (2016). On-chip mid-infrared gas detection using chalcogenide glass waveguide. *Applied Physics Letters*. Vol. 108. 201–210.
4. Demetriou, G. et al. (2016). Refractive index and dispersion control of ultrafast laser inscribed waveguides in gallium lanthanum sulphide for near and mid-infrared applications. *Optics Express*. Vol. 24. 6350–6358.
5. Tian, Y., Xu, R., Hu, L., & Zhang, J. (2011). Intense 2.7 μm and broadband 2.0 μm emission from diode-pumped $\text{Er}^{3+}/\text{Tm}^{3+}/\text{Ho}^{3+}$ -doped fluorophosphate glass. *Optics Letters*. Vol. 36. 3218–3220.
6. Yang, S. et al. (2011). Broadband near-infrared emission in Tm^{3+} - Dy^{3+} codoped amorphous chalcogenide films fabricated by pulsed laser deposition. *Optics Express*. Vol. 19. 26529–26535.
7. Karaksina, E. V. et al. (2016). Preparation of high-purity Pr^{3+} doped Ge-As-Se-In-I glasses for active mid-infrared optics. *Journal of Luminescence*. Vol. 177. 275–279.
8. Rizak, V. M., Rizak, I. M., & Semak, D. H. (2001). Функціональні халькогенідні напівпровідники [Functional chalcogenide semiconductors]: *Monohrafiya. Uzhhorod: Zakarpattya – Monograph. Uzhhorod: Transcarpathia*. 152 s. [in Ukrainian].
9. Driscoll T. J., & Lawandy N. M. (1994). Optically encoded second-harmonic generation in bulk silica-based glasses. *Journal of the Optical Society of America B*, Vol. 11, P. 355–371.
10. Kityk I. V., & Majchrowski A. (2004). Second-order non-linear optical effects in BiB_3O_6 glass fibers. *Optical Materials*, Vol. 25, P. 33–37.

УДК 638.975

DOI: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-6>

Юрій ЛУЦЮК

аспірант кафедри професійної та технологічної освіти і загальної фізики, Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського, 2, м. Чернівці, Україна, 58012

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1776-6734>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57215548499

Бібліографічний опис статті: Луцюк, Ю. (2024). Температурні залежності усереднених групових швидкостей акустичних фононів у плоских наноплівках дийодиду свинцю. *Фізика та освітні технології*, 2, 40–46, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-6>

ТЕМПЕРАТУРНІ ЗАЛЕЖНОСТІ УСЕРЕДНЕНИХ ГРУПОВИХ ШВИДКОСТЕЙ АКУСТИЧНИХ ФОНОНІВ У ПЛОСКИХ НАНОПЛІВКАХ ДИЙОДИДУ СВИНЦЮ

Унікальні властивості квазідвовимірних структур на основі шаруватого напівпровідника – дийодиду свинцю – роблять їх привабливими для створення новітніх пристроїв нанoeлектроніки. На даний час розроблено низку технологій отримання квазідвовимірних структур на основі дийодиду свинцю та накопичено великий обсяг результатів експериментального дослідження їхніх властивостей. Проте, робіт, присвячених теоретичному опису явищ і процесів, що мають місце у таких структурах, досить мало. Зокрема, мало вивченим залишається питання ролі акустичних фононів у формуванні характерних властивостей названих структур.

Мета даної роботи полягала в теоретичному дослідженні температурних залежностей середніх групових швидкостей акустичних фононів у наноплівках дийодиду свинцю різної товщини.

Методами класичної динаміки атомів кристалічної ґратки в наближенні пружного континууму розраховані значення частот і групових швидкостей акустичних фононів у гексагональній квазідвовимірній кристалічній структурі – наноплівці дийодиду свинцю (політип $2H-PbI_2$). Обчислення проведені з використанням раніше встановлених нами аналітичних залежностей законів дисперсії цих величин для кожної з мод акустичних фононів усіх можливих поляризацій: зсуву (shear), згину (flexural) та розтягу (dilatational). Подальше усереднення групових швидкостей виконане методами квантової статистики з використанням функції розподілу фононних станів за частотами у 2D-структурі та розподілу Бозе-Ейнштейна.

Таким чином уперше виконано дослідження температурних залежностей середніх швидкостей фононів кожної з указаних поляризацій для різних наборів значень параметра N – кількості шарових пакетів $2H-PbI_2$ у наноплівці, який визначає її товщину. Показано, що зміною температури та товщини наноплівки можна суттєво змінювати швидкість поширення в ній фононів кожної з поляризацій.

Зокрема, зменшенням товщини наноплівки дийодиду свинцю можна досягти зменшення групової швидкості фононів shear-поляризації – у рази, а SA- та AS-поляризацій – в десятки разів. Температурні зміни швидкостей поширення фононів нелінійні – в області низьких температур (нижче 150, 90 і 50 К для фононів SA-, AS- та shear-поляризації, відповідно) їх значення стрімко зростають при збільшенні температури, а при більш високих – практично не залежать від неї.

Результати даного дослідження можуть бути використані для створення термоелектричних пристроїв на основі наноплівок $2H-PbI_2$ з бажаними властивостями, оскільки швидкість теплових потоків, що визначається швидкістю поширення акустичних фононів, регулюється відповідним підбором їх товщини.

Ключові слова: наноструктура, наноплівка, дийодид свинцю, фонон.

Yuriy LUTSIUK

Postgraduate student at the Department of Vocational and Technological Education and General Physics, Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, 2 Kotsiubynskoho str., Chernivtsi, Ukraine, 58012

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1776-6734>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57215548499

To cite this article: Lutsiuk, Yu. (2024). Temperaturni zalezhnosti userednenykh hrupovykh shvydkostey akustychnykh fononiv u ploskykh nanoplivkakh dydydydu svyntsyu [Temperature dependences of the averaged group velocities of acoustic phonons in flat nanofilms of lead diiodide]. *Physics and Educational Technology*, 2, 40–46, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-6>

TEMPERATURE DEPENDENCES OF THE AVERAGED GROUP VELOCITIES OF ACOUSTIC PHONONS IN FLAT NANOFILMS OF LEAD DIIODIDE

Unique properties of quasi-two-dimensional structures based on the layered semiconductor lead diiodide make them attractive for the creation of advanced nanoelectronic devices. Currently, a number of technologies have been developed for obtaining quasi-two-dimensional structures based on lead diiodide, and a large body of experimental research results on their properties has been accumulated. However, there are relatively few studies dedicated to the theoretical description of the phenomena and processes occurring in such structures. In particular, the role of acoustic phonons in shaping the characteristic properties of these structures remains largely unexplored.

The purpose of this work was to investigate theoretically the temperature dependencies of the average group velocities of acoustic phonons in lead diiodide nanofilms of varying thickness.

Using the methods of classical dynamics of atoms in a crystalline lattice within the approximation of an elastic continuum, the frequencies and group velocities of acoustic phonons in a hexagonal quasi-two-dimensional crystalline structure – lead diiodide nanofilm (polytype 2H-PbI₂) – were calculated. The calculations were carried out using previously established analytical dependencies of the dispersion laws for these quantities for each mode of acoustic phonons with all possible polarizations: shear, flexural, and dilatational. Further averaging of the group velocities was performed using methods of statistical physics with the distribution function of phonon states by frequencies in the 2D-structure and the Bose-Einstein distribution.

Thus, for the first time, a study was conducted on the temperature dependencies of the average phonon velocities for each of the mentioned polarizations for different sets of values of the parameter N – the number of layered 2H-PbI₂ packets in the nanofilm, which determines its thickness. It has been shown that by changing the temperature and thickness of the nanofilm, the propagation speed of phonons for each polarization can be significantly altered.

Particularly, by reducing the thickness of the lead diiodide nanofilm, the group velocity of shear-polarized phonons can be reduced by several times, and the velocities of SA- and AS-polarized phonons can be reduced by tens of times. The temperature changes in phonon propagation speeds are nonlinear: in the low-temperature range (below 150, 90, and 50 K for SA-, AS-, and shear-polarized phonons, respectively), their values increase rapidly with rising temperature, whereas at higher temperatures, they are almost independent of it.

Results of this study can be used to create thermoelectric devices based on 2H-PbI₂ nanofilms with the desired properties, since the speed of heat flows, determined by the speed of propagation of acoustic phonons, is regulated by the appropriate thickness selection.

Key words: nanostructure, nanofilm, lead diiodide, phonon.

Вступ. Дана робота присвячена розвитку методів теоретичного дослідження властивостей системи акустичних фоновів у наноплівках – плоских кристалічних структурах нанометрової товщини. Кристалічні структури такого типу (2D-структури) вважаються привабливими матеріалами для створення новітніх пристроїв наноелектроніки, чим пояснюється актуальність вивчення їхніх властивостей та розвитку технологій їх отримання [1, 2]. До таких належать, зокрема, двовимірні системи, отримані з шаруватих кристалів, шарові пакети яких слабо зв'язані між собою молекулярним (Ван-дер-Ваальсовим) зв'язком, що дає змогу вирощувати квазидвовимірні структури товщиною в декілька шарових пакетів [3].

Одним із кристалів вказаного типу є дийодид свинцю (PbI₂), стійкий інтерес до вивчення властивостей 2D-структур на основі якого спостерігається приблизно від початку 21-го століття і донині. Причиною цього є та обставина, що поєднання унікальних властивостей цього шаруватого напівпровідника з не менш унікальними властивостями низьковимірних структур на його основі виявилось доволі перспективним напрямком

у справі конструювання новітніх поколінь різноманітних електронних, електрооптичних [4–6] та термоелектричних [7] пристроїв.

Крім того, останнім часом активно розвиваються технології синтезу перовскитів типу CH₃NH₃PbI₃ – двовимірних гібридних органічно-неорганічних структур, прекурсором для виготовлення яких є тонкі шари PbI₂ [8], придатних для виготовлення ефективних пристроїв фотоніки [9].

Необхідність розвитку вказаних технологій визначає високу актуальність поглибленого вивчення особливостей перебігу фізичних процесів у двовимірних структурах на основі шаруватих кристалів, зокрема, дийодиду свинцю. Як наслідок, останніми роками були опубліковані результати ряду експериментальних і теоретичних досліджень різноманітних властивостей 2D-структур на основі PbI₂. Зокрема, вивчено структуру фоновного спектра і закономірності явища теплопереносу в таких структурах, трансформації енергетичного спектра електронної системи внаслідок її взаємодії з оптичними фонами та зумовлені цим зміни смуги екситонного поглинання в них.

Проте теоретичні аспекти впливу взаємодії електронів з акустичними фононами – важливого чинника впливу на перебіг процесів електропровідності, термоелектричної генерації, оптичного поглинання та випромінювання в квазідвовимірних структурах – на сьогоднішній день висвітлені слабо через відсутність явного вигляду законів дисперсії різних гілок спектра акустичних фононів у них. Тож створення методів теоретичного дослідження системи акустичних фононів та їх взаємодії з електронами у 2D-структурах є актуальною задачею.

Як один із можливих способів її вирішення нами запропоновано простий спосіб встановлення аналітичних залежностей енергій та групових швидкостей акустичних фононів у плоских плівках нанорозмірної товщини (наноплівках) [10]. Метод ґрунтується на ідеї розвинутого у ряд Фур'є амплітуд компонент вектора зміщень пружних коливань атомів кристалічної ґратки. Його застосування дало змогу теоретичного дослідження залежностей енергій та групових швидкостей акустичних фононів, обмежених у наноплівках типу GaN і AlN [10] та 2H-PbI₂ [11] від хвильового вектора фонона та товщини наноплівки.

Використання результатів, представлених у вказаних роботах, дає змогу здійснити подальші теоретичні дослідження впливу акустичних фононів на різноманітні фізичні властивості таких наноструктур. Зокрема, це дає змогу оцінити температурні зміни термоелектричної ефективності наноплівок різної товщини оскільки їхня теплопровідність визначається усередненою груповою швидкістю акустичних фононів [12].

Метою дослідження, результати якого висвітленого у цій статті, є встановлення температурних залежностей середніх швидкостей кожної з гілок акустичних фононів у наноплівці 2H-PbI₂, та вивчення можливості їх зміни при змінах її товщини.

Модель та методика обчислення середніх швидкостей. Кристалічні структури товщиною у декілька шарів діюдиду свинцю отримуються методами осадження з пари, вирощування з колоїдних розчинів або механічним відшаруванням від об'ємних кристалів PbI₂ [13-15]. Процеси поширення акустичних фононів у таких структурах можуть бути описані в рамках моделі пружного континууму (див., наприклад, [16]).

У рамках цієї моделі рівняння руху для пружних коливань в анізотропному середовищі будується з використанням характеристик як коливань – компонентів вектора зміщень, так і середовища – його густини ρ та пружних констант c_{ij} .

Для гексагональних 2D-структур, до яких належать наноплівки діюдиду свинцю (політип 2H-PbI₂), у роботі [17] наведено рівняння руху, які описують усі можливі типи акустичних коливань, обмежених у цих структурах – коливання зсуву (*shear*), згину (*flexural*) та розтягу (*dilatational*). Використовуючи ці рівняння з крайовими умовами, що відповідають вільним (ненавантаженим) поверхням наноплівки, нами [10] отримано аналітичні вирази, що описують залежності частот ω_n і групових швидкостей v_n кожної з мод таких коливань від величини хвильового вектора q :

$$\omega_n^{sh}(q) = \sqrt{\frac{c_{66}q^2 + c_{44}(n\pi/d)^2}{\rho}}, \quad (1)$$

$$v_n^{sh}(q) = \frac{c_{66}q}{\sqrt{\rho_0(c_{66}q^2 + (\frac{n\pi}{d})^2 c_{44})}} \quad (2)$$

– для гілки коливань зсуву та

$$\omega_n^{SA/AS}(q) = \sqrt{\frac{F_{1n}(q) \pm \sqrt{F_{2n}(q)}}{2\rho}}, \quad (3)$$

$$v_n^{SA/AS}(q) = \{[(c_{11} + c_{44})\sqrt{F_{2n}(q)} \pm (\frac{n\pi}{d})^2[2(c_{11} + c_{44})^2 - (c_{11} - c_{44})(c_{33} - c_{44})]]q \pm \pm(c_{11} - c_{44})^2 q^3\} [2\rho F_{2n}(q)(F_{1q}(q) \pm \sqrt{F_{2n}(q)})]^{-1/2} \quad (4)$$

– для дилатаційних (SA) або флексуральних (AS) фононів. Тут n – номер моди (квантове число коливного стану), d – товщина наноплівки, а

$$F_{1n}(q) = (\tilde{n}_{11} + \tilde{n}_{44})q^2 + (n\pi/d)^2(c_{33} + c_{44}) \quad (5)$$

і

$$F_{2n}(q) = (\tilde{n}_{11} - \tilde{n}_{44})^2 q^4 + 2(n\pi/d)^2[2(c_{33} + c_{44})^2 - - (c_{11} - c_{44})(c_{33} - c_{44})]q^2 + (n\pi/d)^4(\tilde{n}_{33} - \tilde{n}_{44})^2 \quad (6)$$

– допоміжні функції. У випадку $n = 0$ формули (1–4) визначають, відповідно, закони дисперсії швидкості TA_2 -, LA - і TA_1 -мод нормальних коливань у масивному (3D) кристалі.

Середні значення групових швидкостей $\bar{v}^\alpha$ обмежених фононів кожної з поляризацій $\alpha = \{sh, SA, AS\}$ знаходяться [17] як швидкості відповідних хвильових пакетів з модами, заселеність яких визначається значенням температури системи відповідно до закону розподілу

Бозе-Ейнштейна та щільністю частотного розподілу коливних станів

$$g_n^\alpha(\omega) = \frac{S_0}{2\pi} q_n^\alpha(\omega) \frac{dq_n^\alpha(\omega)}{d\omega}, \quad (7)$$

де S_0 – площа елементарної комірки 2D-структури.

Наведена у [17] формула для розрахунку температурних залежностей середніх значень швидкостей передбачає інтегрування за зміною ω – частотою коливаль, а це потребує знання залежності $q(\omega)$. Використовуючи зв'язок групової швидкості та частоти, нами здійснено перехід до інтегрування за змінною q

$$\bar{v}^\alpha(T) = \frac{\sum_n \int_0^{q_D} \frac{\omega_n^\alpha(q)}{\exp(\frac{\hbar\omega_n^\alpha(q)}{kT}) - 1} dq}{\sum_n \int_0^{q_D} \frac{\omega_n^\alpha(q)}{v_n^\alpha(q) \cdot [\exp(\frac{\hbar\omega_n^\alpha(q)}{kT}) - 1]} dq}, \quad (8)$$

що дає змогу виразити усереднені значення швидкостей через встановлені залежності (1–4). Тут q_D – Дебаївський радіус комірки Вігнера-Зейтца 2D-структури, а k – стала Больцмана.

Формула (8) дає змогу досліджувати залежності середніх значень групових швидкостей акустичних фононів, обмежених у наноплівці, від її товщини d та температури T маючи явний вигляд залежності частот та групових швидкостей фононних мод від хвильового вектора q .

Результати обчислень та їх обговорення. Використовуючи співвідношення (1–4) та (8), а також значення величин, що визначають структуру і механічні властивості дийодиду свинцю 2H-політипу (параметри ґратки $a = 0,4557$ та $c = 0,6979$ нм, а також густину $\rho = 6,16$ г/см³ [18]; пружні сталі, визначені за даними роботи [19]: $c_{11} = 27,7$, $c_{33} = 20,2$, $c_{44} = 6,2$, $c_{66} = 3$ і $c_{13} = 11,3$ ГПа), нами досліджено характер залежності середніх значень величин групових швидкостей акустичних фононів, обмежених у наноплівці типу 2H-PbI₂, від її товщини d та температури T . При цьому бралось до уваги, що примітивна комірка 2H-PbI₂ будується на трійці базисних векторів $(\sqrt{3}/2a, -a/2, 0)$, $(0, a, 0)$, $(0, 0, c)$, [20], звідки визначено $q_D = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \frac{1}{a}$, а товщина наноплівки визначається кількістю шарових пакетів N ($d = Nc$).

Зауважимо, що практичне використання формули (8) спряжене з деякими складностями обчислень. По-перше, використана нами модель пружного континууму передбачає існування

нескінченної кількості мод ($n = 0, 1, 2, \dots$) фононних станів кожної з поляризацій, а тому виникає необхідність їх обмеження – «обрізання спектру акустичних фононів» [17]. По-друге, оскільки підінтегральні вирази інтегралів, що містяться в знаменнику формули (8), мають особливість у точці $q = 0$ оскільки в ній усі $v_{n \neq 0}^\alpha = 0$, то їх слід обчислювати наближено як

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{\delta}^{q_D} \frac{\omega_n^\alpha(q)}{v_n^\alpha(q) \cdot [\exp(\frac{\hbar\omega_n^\alpha(q)}{kT}) - 1]} dq.$$

Вибір кількості доданків у сумах (8) здійснювався з міркувань можливості збудження відповідної моди при даному значенні температури та виконання умови, щоб при вибраному значенні δ абсолютна похибка обчислень не перевищувала 5%. Результати відповідно виконаних розрахунків подані на рис. 1.

Аналіз отриманих результатів свідчить, що загальною для фононів усіх поляризацій є тенденція до зменшення величин середніх швидкостей зі зменшенням товщини наноплівки та їх нелінійного зростання при збільшенні температури (рис. 1). Величина і швидкість указаних змін різна для фононів різної поляризації, що пояснюється відмінністю напружень, викликаних відповідними деформаціями кристалічної ґратки.

Зокрема, помітні зміни розрахованих при фіксованому параметрі $T = 300$ К величин середніх швидкостей у наноплівці, порівняно з їх значеннями у масивному кристалі 2H-PbI₂, починаються при зменшенні її товщини нижче 7,68 нм у випадку фононів *shear*-поляризації (Рис. 1, *a*; крива $N = 11$). Для фононів *SA*- та *AS*-поляризацій вони починаються при значеннях товщини наноплівки менших, ніж 21 нм (рис. 1, *b* та рис. 1, *c*; криві $N = 30$). При цьому в наноплівці, що складається з одного шарового пакета ($N = 1$, товщина 0,698 нм) швидкість фононів *shear*-поляризації менша від її значення у масивному кристалі 2H-PbI₂ приблизно в 5,6 раз; у випадку фононів *SA*- та *AS*-поляризацій аналогічні зменшення становлять, відповідно, 27 та 23,4 рази.

Згідно результатів обчислень, швидкість температурних змін величин середніх швидкостей фононів спадає при збільшенні температури. Суттєві (понад 10%) зміни середньої швидкості поширення фононів *shear*-поляризації можливі

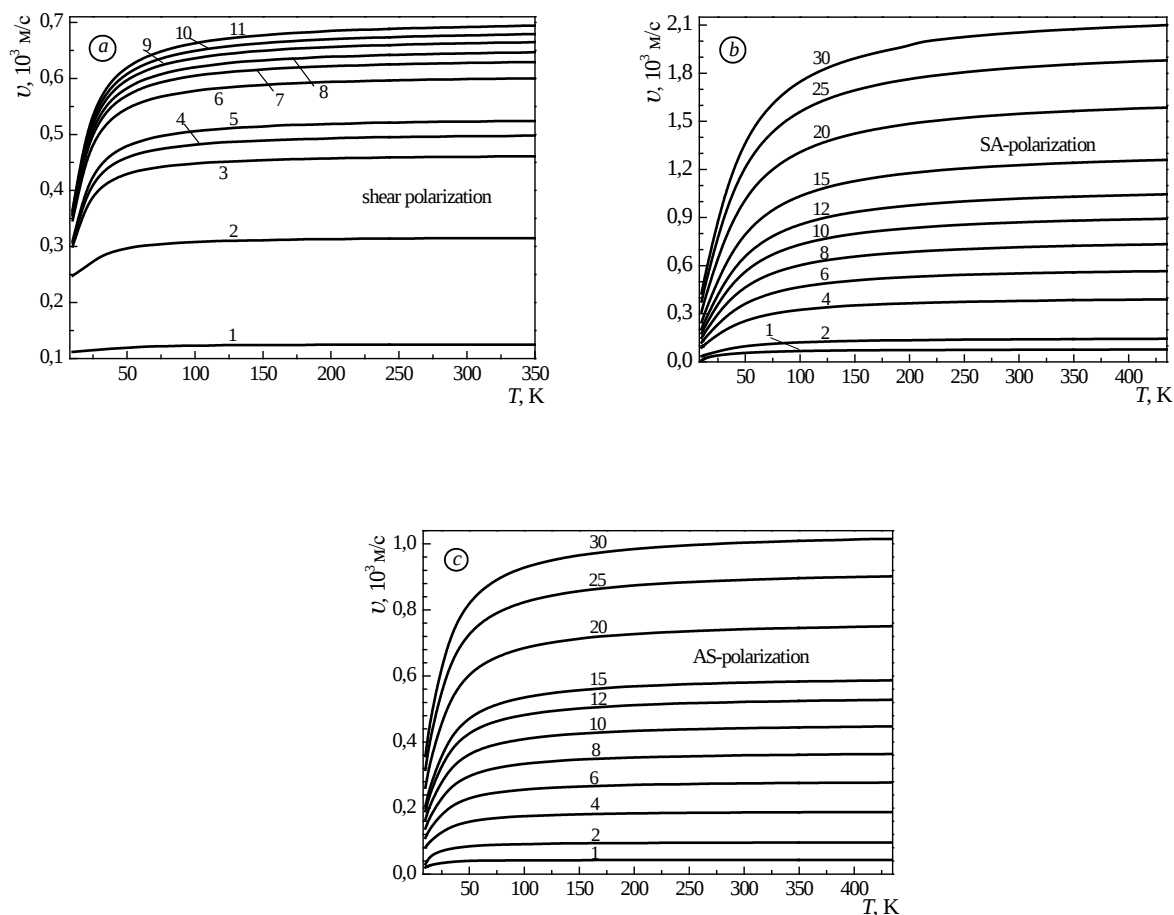


Рис. 1. Температурні залежності середніх значень групових швидкостей акустичних фоновів різної поляризації: зсуву (a), розтягу (b) та згину (c) у наноплівках товщиною в N шарових пакетів 2H-PbI_2 (значення N указані цифрою над відповідною кривою)

при температурах, нижчих 50 K (рис. 1, a), а фоновів SA- та AS-поляризацій – нижче 150 і 90 K, відповідно.

Висновки. У рамках наближення пружного континууму з використанням раніше отриманих законів дисперсії швидкостей вперше виконана кількісна оцінка залежності середніх швидкостей фоновів кожної з можливих поляризацій у наноплівці типу 2H-PbI_2 від її товщини та температури.

Показано, що відповідним вибором товщини наноплівки можна суттєво впливати на значення швидкості поширення акустичних фоновів у ній. Зменшенням товщини наноплівки можна досягти зменшення швидкості поширення фоновів, залежно від їх поляризації та температури, у рази для

фоновів shear-поляризації та в десятки разів – для SA- та AS-поляризацій.

Температурні залежності швидкостей поширення фоновів нелінійні – в області низьких температур (нижче 150, 90 і 50 K для фоновів SA-, AS- та shear-поляризації, відповідно) суттєво зростаючі, а при більш високих – практично незмінні.

Наявність указаних залежностей може бути використана для створення термоелектричних пристроїв на основі наноплівок 2H-PbI_2 з бажаними властивостями завдяки можливості керування тепловими потоками в них. Адже швидкість теплових потоків визначається, зокрема і швидкістю поширення акустичних фоновів, що регулюється відповідним підбором товщини наноплівки.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Tsakalakos T. Nanostructures and Nanotechnology: Perspectives and New Trends. In: T. Tsakalakos, I. A. Ovid'ko, A. K. Vasudevan (eds) *Nanostructures: Synthesis, Functional Properties and Applications. NATO Science Series (Series II: Mathematics, Physics and Chemistry)*, vol. 128. Dordrecht: Springer, 2003. P. 1–36.
2. Kovalenko M. V., Manna L., Cabot A., [et al.]. Prospects of Nanoscience with Nanocrystals. *ACS Nano*. 2015. Vol. 9. № 2. P. 1012–1057. <https://doi.org/10.1021/nn506223h>
3. Toulouse A. S., Isaacoff B. P., Shi G., [et al.]. Frenkel-like Wannier-Mott Excitons in Few-Layer PbI_2 . *arXiv: 1408.1942v2 [cond-mat.mes-hall]* (Submit. 18 Feb 2015). <https://doi.org/10.48550/arXiv.1408.1942> (дата звернення: 12.06.2024).
4. Yamamoto A., Nakahara H., Yano S., [et al.]. Exciton dynamics in PbI_2 ultra-thin microcrystallites. *Phys. stat. sol. (b)*. 2001. Vol. 224. № 1. P. 301–305. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200103\)224:1<301::AID-PSSB301>3.0.CO;2-N](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200103)224:1<301::AID-PSSB301>3.0.CO;2-N)
5. Savchuk A. I., Fediv V.I., Kandyba Ye.O., [et al.]. Platelet-shaped nanoparticles of PbI_2 and PbMnI_2 embedded in polymer matrix. *Mat. Sci.&Engineering: C*. 2002. Vol. 19. № 1–2. P. 59–62. DOI: 10.1016/S0928-4931(01)00439-8.
6. Finlayson C. E. and Sazio P. J. A. Highly efficient blue photoluminescence from colloidal lead-iodide nanoparticles. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006. Vol. 39. № 8. P. 1477–1480. DOI: 10.1088/0022-3727/39/8/003.
7. Peng B., Mei H., Zhang H., Shao H., Xu K., Jin Q., Soukoulis C. M., Zhu H. High thermoelectric efficiency in monolayer PbI_2 from 300 K to 900 K. *Inorg. Chem. Front.* 2019. Vol. 6. P. 920–928. <https://doi.org/10.1039/C8QI01297K>
8. Dou L., Wong A. B., Yu Y., Lai M., Kornienko N., Eaton S. W., Fu A., Bischak C. G., Ma J., Ding T., Ginsberg N. S., Wang L. W., Alivisatos A. P., Yang P. Atomically thin two-dimensional organic-inorganic hybrid perovskites. *Science*. 2015. Vol. 349. № 6255. P. 1518–1521. DOI: 10.1126/science.aac7660
9. Zhang W., Eperon G., Snaith H. Metal halide perovskites for energy applications. *Nature Energy*. 2016. Vol. 1. № 16048. P. 1–8. doi: 10.1038/nenergy.2016.48.
10. Lutsiuk Yu. V., Kramar V. M. Analytical calculation of frequency spectrum and group velocities of acoustic phonons in quasi-two-dimensional nanostructures. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2020. Vol. 12. №5. P. 05033(5pp). DOI: 10.21272/jnep.
11. Lutsiuk Yu., Kramar V., Petryk I. Frequency spectrum and group velocities of acoustic phonons in PbI_2 nanofilms. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2022. Vol. 23. № 3. P. 478–483. <https://doi.org/10.15330/pcss.23.3.478-483>
12. Balandin A. A. and Wang K. L. Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well. *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. № 3. P. 1544–1549. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.1544>
13. Zhong M., Zhang S., Huang L., You J., Wei Z., Liu X., Li J. Large-scale 2D PbI_2 monolayers: experimental realization and their band-gap related properties. *Nanoscale*. 2017. Vol. 9. № 11. P. 3736–3741. DOI:10.1039/c6nr07924e
14. Wangyang P., Sun H., Zhu X., Yang D., Gao X. Mechanical exfoliation and Raman spectra of ultrathin PbI_2 single crystal. *Mater. Lett.* 2016. Vol. 168. P. 68–71. DOI:10.1016/j.matlet.2016.01.034
15. Zheng W., Zhang Z., Lin R., Xu K., He J., Huang F. High-crystalline 2D layered PbI_2 with ultrasoft surface: liquid-phase synthesis and application of high-speed photon detection. *Adv. Electron. Mater.* 2016. Vol. 2. № 11. P. 1600291. <https://doi.org/10.1002/aelm.201600291>.
16. Bannov N., Mitin V., Strosio M. Confined acoustic phonons in a free-standing quantum well and their interaction with electrons. *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1994. Vol. 183. P. 131–142. 10.1107/S0567739475001787.
17. Pokatilov E. P., Nika D. L., Balandin A. A. Phonon spectrum and group velocities in $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ and related heterostructures. *Superlattices and Microstructures*. 2003. Vol. 33. № 3. P. 155–171. doi: 10.1016/S0749-6036(03)00069-7.
18. Minagava T. Common polytypes of PnI_2 at low and high temperatures and the 2H-12R transformation. *Acta Cryst. A*, 1975. Vol. 31. № 6. P. 823–824. URL: <https://www.ee.buffalo.edu/faculty/mitin/old/Papers/074>
19. *Lead diiodide (PbI_2): Sound velocities, elastic moduli; Grüneisen parameters, effective charge, force constants*. In: O. Madelung, U. Rössler, M. Schulz (Eds.). Springer Materials. Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter 41C : Non-Tetrahedrally Bonded Elements and Binary Compounds. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 1998. 923 p. DOI: 10.1007/b71138.
20. Schlüter I. Ch., Schlüter M. Electronic structure and optical properties of PbI_2 . *Phys. Rev. B*. 1974. Vol. 9, № 4. P. 1652–1663. URL: <https://escholarship.org/uc/item/4hj3r1bt>.

REFERENCES:

1. Tsakalakos, T. (2003). Nanostructures and Nanotechnology: Perspectives and New Trends. In: T. Tsakalakos, I. A. Ovid'ko, A. K. Vasudevan (Eds), *Nanostructures: Synthesis, Functional Properties and Applications. NATO Science Series (Series II: Mathematics, Physics and Chemistry)*, 128, pp. 1-36). Dordrecht: Springer.
2. Kovalenko, M. V., Manna, L., Cabot, A., Hens, Z., Talapin, D. V., Kagan, Ch. R., Klimov, V. I., Rogach, [et al.] (2015). Prospects of Nanoscience with Nanocrystals. *ACS Nano*, 9(2), 1012–1057. <https://doi.org/10.1021/nn506223h>

3. Toulouse, A. S., Isaacoff, B. P., Shi, G., Matuchová, M., Kioupakis, E., & Merlin, R. (2015). Frenkel-like Wannier-Mott Excitons in Few-Layer PbI_2 . *arXiv: 1408.1942v2 [cond-mat.mes-hall]*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1408.1942>.
4. Yamamoto, A., Nakahara, H., Yano, S., Goto, T., & Kasuya, S. (2001). Exciton dynamics in PbI_2 ultra-thin microcrystallites. *Phys. stat. sol. (b)*, 224(1), 301–305. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(200103\)224:1<301::AID-PSSB301>3.0.CO;2-N](https://doi.org/10.1002/1521-3951(200103)224:1<301::AID-PSSB301>3.0.CO;2-N).
5. Savchuk, A. I., Fediv, V.I., Kandyba, Ye.O., Savchuk, T.A., Stolyarchuk, I.D., & Nikitin P.I. (2002). Platelet-shaped nanoparticles of PbI_2 and PbMnI_2 embedded in polymer matrix. *Materials Science and Engineering: C*, 19(1–2), 59–62. DOI: 10.1016/S0928-4931(01)00439-8.
6. Finlayson, C. E., & Sazio, P. J. A. (2006). Highly efficient blue photoluminescence from colloidal lead-iodide nanoparticles. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 39(8), 1477–1480. DOI: 10.1088/0022-3727/39/8/003.
7. Peng, B., Mei, H., Zhang, H., Shao, H., Xu, K., Jin, Q., Soukoulis, C. M., & Zhu, H. (2019). High thermoelectric efficiency in monolayer PbI_2 from 300 K to 900 K. *Inorg. Chem. Front.*, 6, 920–928. <https://doi.org/10.1039/C8QI01297K>.
8. Dou, L., Wong, A. B., Yu, Y., Lai, M., Kornienko, N., Eaton, S. W., Fu, A., Bischak, C. G., Ma, J., Ding, T., Ginsberg, N. S., Wang, L. W., Alivisatos, A. P., & Yang, P. (2015). Atomically thin two-dimensional organic-inorganic hybrid perovskites. *Science*, 349(6255), 1518–1521. DOI: 10.1126/science.aac7660.
9. Zhang, W., Eperon, G., & Snaith, H. (2016). Metal halide perovskites for energy applications. *Nature Energy*, 1(16048), 1–8. doi: 10.1038/nenergy.2016.48.
10. Lutsiuk Yu. V., & Kramar V. M. (2020). Analytical calculation of frequency spectrum and group velocities of acoustic phonons in quasi-two-dimensional nanostructures. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 12(5), 05033(5pp). DOI: 10.21272/jnep.
11. Lutsiuk Yu., Kramar V., & Petryk I. (2022). Frequency spectrum and group velocities of acoustic phonons in PbI_2 nanofilms. *Phys. Chem. Sol. St.*, 23(3), 478–483. <https://doi.org/10.15330/pccs.23.3.478-483>.
12. Balandin, A. A., & Wang, K. L. (1998). Significant decrease of the lattice thermal conductivity due to phonon confinement in a free-standing semiconductor quantum well. *Phys. Rev. B* 58(3), 1544–1549. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.1544>.
13. Zhong, M., Zhang, S., Huang, L., You, J., Wei, Z., Liu, X., & Li, J. (2017). Large-scale 2D PbI_2 monolayers: experimental realization and their band-gap related properties. *Nanoscale*, 9(11), 3736–3741. DOI:10.1039/c6nr07924e.
14. Wangyang, P., Sun, H., Zhu, X., Yang, D., & Gao, X. (2016). Mechanical exfoliation and Raman spectra of ultrathin PbI_2 single crystal. *Mater. Lett.*, 168, 68–71. DOI:10.1016/j.matlet.2016.01.034.
15. Zheng, W., Zhang, Z., Lin, R., Xu, K., He, J., & Huang, F. (2016). High-crystalline 2D layered PbI_2 with ultrasmooth surface: liquid-phase synthesis and application of high-speed photon detection. *Adv. Electron. Mater.*, 2(11), 1600291. <https://doi.org/10.1002/aelm.201600291>.
16. Bannov, N., Mitin, V., & Strosio, M. (1994). Confined acoustic phonons in a free-standing quantum well and their interaction with electrons. *Phys. Stat. Sol.(b)*, 183, 131–142. Retrieved from: <https://www.ee.buffalo.edu/faculty/mitin/old/Papers/074>
17. Pokatilov, E. P., Nika, D. L., & Balandin, A. A. (2003). Phonon spectrum and group velocities in $\text{AlN}/\text{GaN}/\text{AlN}$ and related heterostructures. *Superlattices and Microstructures*, 33(3), 155–171. doi: 10.1016/S0749-6036(03)00069-7.
18. Minagava, T. (1975). Common polytypes of PnI_2 at low and high temperatures and the 2H-12R transformation. *Acta Cryst. A*, 31(6), 823–824. doi: 10.1107/S0567739475001787.
19. Lead diiodide (PbI_2): Sound velocities, elastic moduli; Grüneisen parameters, effective charge, force constants. In: O. Madelung, U. Rössler, M. Schulz (Eds.). Springer Materials. Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter. 41C : Non-Tetrahedrally Bonded Elements and Binary Compounds. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 1998. 923 p. DOI: 10.1007/b71138.
20. Schlüter, I. Ch., & Schlüter, M. (1974). Electronic structure and optical properties of PbI_2 . *Phys. Rev. B*. Vol. 9, № 4. P. 1652–1663. Retrieved from: <https://escholarship.org/uc/item/4hj3r1bt>.

УДК 621.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-7>

Тарас МЕЛЬНИЧУК

аспірант, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025

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

Бібліографічний опис статті: Мельничук, Т., Мирончук, Г. (2024). Оптичні властивості кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ легованих Dy. *Фізика та освітні технології*, 2, 47–55, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-7>

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ ЛЕГОВАНИХ Dy

У роботі проведено аналіз впливу легування кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ атомами Dy на оптичні властивості. Для досліджуваних кристалів був проведений контроль фази та визначення хімічних композицій. Встановлено, що кристал має однофазну морфологію, хоча всіх об'єктах дослідження є видимі темні плями, більш світлі та темні ділянки, що виникають унаслідок неоднорідної шорсткості поверхні, викликані різанням і шліфуванням. Вміст компонентів добре узгоджується з початковим складом синтезованого зразка, що підтверджує якісну оцінку елементного складу та однорідність зразків у масштабах вибраної області сканування.

Для оцінки ширини забороненої зони проведено дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання в області краю фундаментального поглинання. Встановлено, що досліджуваний кристал є непрямоzonним. Оцінена ширина забороненої в діапазоні температур 100–300 K становить 2,23 eV при $T=300$ K, та 2,41 eV при $T=100$ K. Визначено, що введення рідкоземельного елементу (Dy) до $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ сприяє збільшенню ширини забороненої зони. Встановлено, що робочою областю досліджуваного кристалу можна вважати діапазон від 0,6 мкм до 15 – 16 мкм. Визначено температурний коефіцієнт зміни ширини забороненої зони, який становить (β): $-9 \cdot 10^{-4}$ eV/K, що корелює зі значенням β для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ ($-8,5 \cdot 10^{-4}$ eV/K). Отримані результати дозволяють зробити висновок про єдиний механізм теплової зміни ширини забороненої зони для досліджених зразків, оскільки коефіцієнти, що описують цю зміну, мають однаковий порядок. Визначено температурний коефіцієнт зміни ширини забороненої зони, який становить (β): $-9 \cdot 10^{-4}$ eV/K, що корелює зі значенням β для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ ($-8,5 \cdot 10^{-4}$ eV/K). Отримані результати дозволяють зробити висновок про єдиний механізм теплової зміни ширини забороненої зони для всіх досліджених зразків, оскільки коефіцієнти, що описують цю зміну, мають однаковий порядок.

Ключові слова: напівпровідники, оптичне поглинання, пропускання, енергія Urbach.

Taras MELNYCHUK

Graduate student, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

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

To cite this article: Melnychuk, T., Myronchuk, G. (2024). Optychni vlastyvyosti krystaliv $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ lehovanykh Dy [Optical properties of Dy-doped $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ crystallites]. *Physics and Educational Technology*, 2, 47–55, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-7>

OPTICAL PROPERTIES OF Dy-DOPED $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ CRYSTALLITES

This study analyzes the impact of doping $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ crystals with Dy atoms on their optical properties. Phase control and chemical composition determination were conducted on the studied crystals. It was established that the crystal exhibits a single-phase morphology, although all samples show visible dark spots, lighter, and darker areas caused by the non-uniform surface roughness resulting from cutting and grinding. The content of the components is in good agreement with the initial composition of the synthesized sample, confirming the qualitative assessment of the elemental composition and homogeneity of the samples within the selected scanning area.

To estimate the bandgap width, the spectral distribution of the absorption coefficient in the fundamental absorption edge region was investigated. It was found that the studied crystal is an indirect-gap semiconductor. The estimated bandgap width in the temperature range of 100-300 K is 2.23 eV at $T=300$ K and 2.41 eV at $T=100$ K. It was determined that the introduction of the rare-earth element (Dy) into $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ contributes to the increase in the bandgap width. It was established that the operating range of the studied crystal can be considered as the range from 0.6 μm to 15-16 μm . The temperature coefficient of the bandgap width change was determined to be $-9 \cdot 10^{-4}$ eV/K, which correlates with the value for $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ ($-8.5 \cdot 10^{-4}$ eV/K). The obtained results allow us to conclude about a single mechanism of thermal change in the bandgap width for all studied samples, since the coefficients describing this change have the same order.

The Urbach parameters and the electron-phonon interaction constant were calculated. An analysis of the obtained data indicates an increase in the Urbach energy with increasing temperature of the samples in the range from 100 to 300 K, which can be explained by an increase in the concentration of charged defects, which at low temperatures were neutral but undergo thermal ionization when heated. It was established that doping leads to an increase in the electron-phonon interaction constant. Such an increase is probably due to the presence of dysprosium (Dy) ions at the silver (Ag) sites and an increase in the concentration of vacancies in the silver sublattice. Both of these factors, as charged impurities, affect the electron-phonon interaction, enhancing it.

Key words: optical properties, non-linear optical materials, second harmonic generation.

Останнім часом можна спостерігати підвищений інтерес до дизайну ІЧ-оптичних пристроїв на основі халькогенідів. Особливий інтерес представляють потрійні і четвертинні кристали (Kityk, 2004; Kulyk, 2009; Sahraoui, 2010).

Кристали халькогенідів, на відміну від оксидів, мають більшу область прозорості, яка охоплює також середню ІЧ область спектру (Liang, 2017). Під час переходу від S до Se до Te халькогени стають більш поляризованими, енергія забороненої зони зменшується, а нелінійна оптична сприйнятливості як другого, так і третього порядку посилюється. У той же час включення рідкоземельних атомів, як правило, призводить до значного зменшення ефективної забороненої зони та зниження прозорості, яка є основним параметром для оптоелектронних застосувань. У даній роботі ми приділимо увагу вивченню перспективних халькогенідних оптичних кристалів, легованих рідкоземельними елементами.

Найбільш популярними кристалічними халькогенідними матеріалами для ІЧ-області є такі матеріали, як AgGaS_2 , AgGaSe_2 (Iliopoulos, 2013). Діапазон твердих розчинів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ подібний до AgGaSe_2 . Вони були виявлені в системі AgGaSe_2 - GeSe_2 у роботі з покращення фізичних параметрів потрійних фаз шляхом додавання ди-халькогенідів германію (Liang, 2017). Було встановлено, що додавання GeS_2 до AgGaS_2 та GeSe_2 до AgGaSe_2 покращує три основні параметри:

подвійне променезаломлення, величину забороненої зони та радіаційну стійкість (Shpotyuk, 1997). Покращений поріг лазерного пошкодження четвертинних кристалів робить їх також перспективною альтернативою широко використовуваним AgGaS_2 і AgGaSe_2 для лазерного перетворювача частоти Nd:YAG, а також для багатьох інших застосувань (Abrahams, 1973).

Методика експерименту. Кристали для досліджень були синтезовані методом Бріджмена-Стокбаргера. Умови росту монокристалів наступні: температура в смузі кристалізації – 1250 K; температура відпау – 720 K; температурний градієнт на межі тверде тіло – розплав – 5 K/мм; швидкість росту – 0,1 мм/год; час відпау – 150 год; швидкість охолодження до кімнатної – 5 K/год. Отримані таким чином монокристали $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ мали форму циліндрів діаметром 18 мм і довжиною 30 мм. Для отримання концентрації, близької до концентрації власних структурних дефектів, у вихідну партію вводили домішку Dy (близько 0,2%).

Рентгеноструктурні дослідження (XRD) показали, що легування Nd, Dy, Er не змінило структуру або основні параметри решітки кристала $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$. Проте була помітна зміна висоти та ширини дифракційних відображень. Спостережувана трансформація рентгенограм вказує на спотворення, викликані домішкою, і появу напруженого стану решітки матриці.

Для визначення кількісного та якісного складу кристалів використовуються методи скануючої електронної мікроскопії (SEM) та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (EDX) з використанням скануючого електронного мікроскопа Tescan Vega 3 LMU (Oxford Instruments AZtec ONE System) та REMMA-102-02 з елементним мікроаналізатором.

Спектри пропускання в ІЧ діапазоні отримано з допомогою Фур'є спектрометра «IRAffinity-1S Shimadzu» в режимі пропускання оптичного сигналу.

Спектральні залежності проводили на монохроматорі MDR-208 зі спектральною роздільною здатністю 2 нм. В якості датчика оптичного сигналу ми використали кремнієвий фотодетектор.

Експериментальні результати та їх обговорення. $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ кристалізується в нецентросиметричній простовій групі $Fdd2$ ($a = 12.4423(6) \text{ \AA}$, $b = 23.820(1) \text{ \AA}$, $c = 7.1403(3) \text{ \AA}$ (Parasyuk, 2012). Відомо, що у структурі $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ вузловими точками є атоми Ag, ізотропні параметри яких вказують на значне коливання цих атомів, що призводить до появи дефектів і міграції йонів Ag^{+1} . Іонний радіус йона Ag^{+1} становить $1.15 \text{ \AA}$, а міжатомна відстань $\delta(\text{Ag} - \text{Se})$ рівна $1.25 \text{ \AA}$. Іонні радіуси рідкісно-земельного елементу Dy є досить близькими до іонного радіуса Ag^{+1} , що створює можливість для легування кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ домішками Dy. Кристалічну структуру $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ можна розглядати як аніонну найщільнішу упаковку у відповідних пустотах якої локалізовані атоми катіонів. У першому наближенні атомів координаційне оточення атомів Ag описується як сильно деформований тетраедр (Parasyuk, 2012). З огляду на це, навколо атомів Ag є 4 атоми Se, для атомів статистичної суміші $\{0.25\text{Ga}:0.75\text{Ge}\}$ КЧ = 4 (тетраедр). Атоми статистичної суміші $\{0.25\text{Ga}:0.75\text{Ge}\}$ в структурі $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ займають ті ж самі позиції, що і атоми Ge в структурі BT-GeS_2 (Grande, 1999). У каналах, що утворені з багатогранників p -елементів Ge і Ga, знаходяться атоми Ag. Оскільки міжатомні відстані $\delta(\text{R} - \text{Se})$, $(\text{R} - \text{Dy})$ знаходяться в межах $2.7 - 2.9 \text{ \AA}$, то атоми РЗЕ можуть частково займати кристалографічну позицію (16b) атомів Ag і в результаті ізоелектронного гетероатомного заміщення утворювати тверді розчини $\text{Ag}_{1-3x}\text{R}_x\text{GaGe}_3\text{Se}_8$.

На рис.1 представлено теоретичний, експериментальний та різницевий профілі дифрактограм зразків сполуки $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$, що легована атомами Dy.

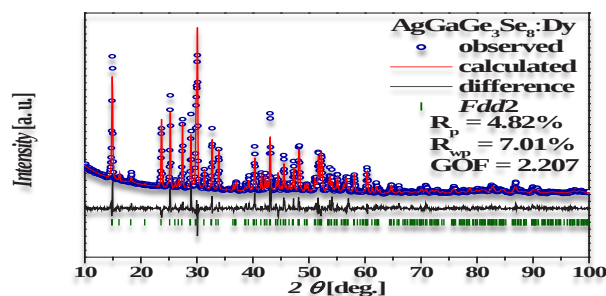


Рис. 1. Теоретичні, експериментальні та різницеві між ними профілі дифрактограм селенідів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{R}$ ($\text{R} - \text{Dy}$)

Контроль фази та визначення хімічних композицій був проведений для досліджуваних кристалів за допомогою скануючого електронного мікроскопу TESCAN (SEM), оснащеного детекторами WDS / EDXS для електронних зондових мікроаналізів (EPMA). На рис. 2 представлено SEM мікрозображення частини кристалу $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$.

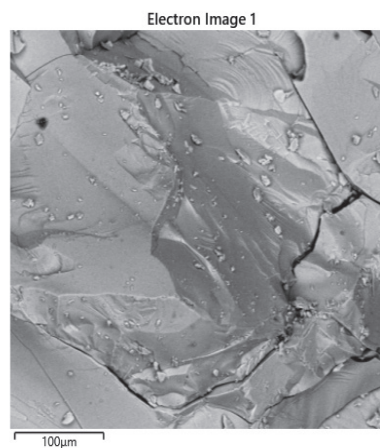


Рис. 2. SEM мікрозображення частини кристалу $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$.

EDS зображення та розподіл елементів для кристалу $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$, представлено на рис. 3, 4.

Можна бачити, що кристали мають однофазну морфологію, хоча всіх об'єктах дослідження є видимі темні плями, більш світлі та темні ділянки, що виникають унаслідок неоднорідної шорсткості поверхні, викликаної

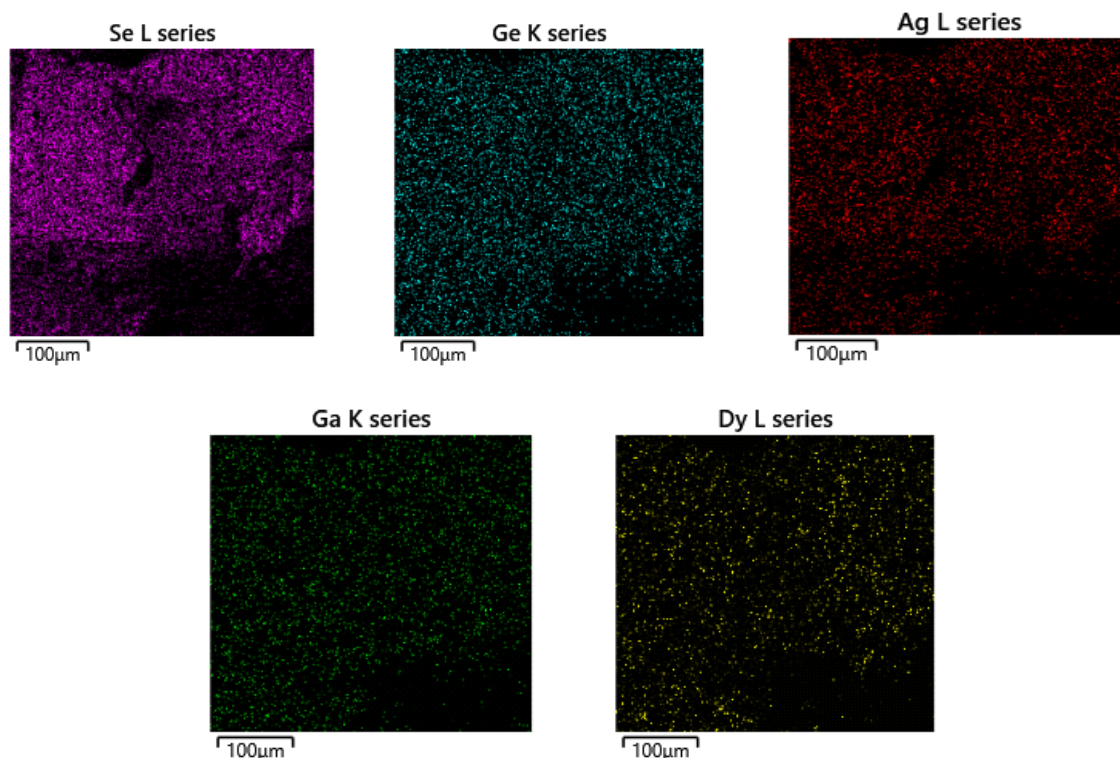


Рис. 3. EDS карта відображуваної області в $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$

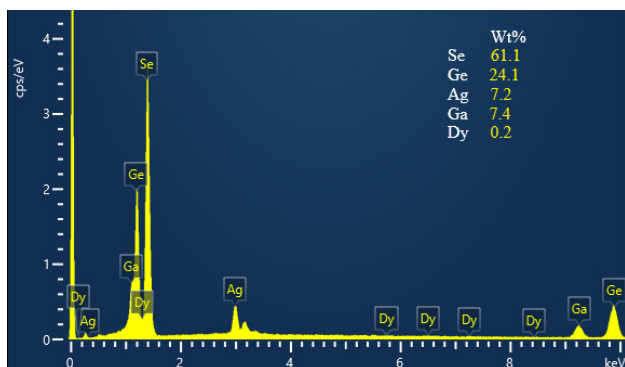


Рис. 4. Присутність елементів Ag, Ga, Ge, Se, Dy в $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$

різанням і шліфуванням. Вміст компонентів визначених методом ЕРМА, добре узгоджується з початковим складом синтезованого зразка. Цей метод підтверджує якісну оцінку елементного складу та однорідність зразків у масштабах вибраної області сканування.

Аби ефективно використовувати халькогенідні матеріали в якості активних і пасивних середовищ для інфрачервоних лазерів, лідарів та систем оптичного зв'язку, необхідно детально дослідити їхні спектри пропускання в середньому та далекому інфрачервоному діапазонах. Такий аналіз дозволить визначити

ступінь прозорості цих матеріалів у потрібній спектральній області, а також виявити наявність як навмисно доданих, так і випадкових домішок, які можуть впливати на їхні оптичні властивості. З огляду на це нами проведено дослідження спектрів пропускання монокристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ в ІЧ діапазоні, які отримано з допомогою Фур'є спектрометра «IRAffinity-1S Shimadzu» в режимі пропускання оптичного сигналу (рис. 5).

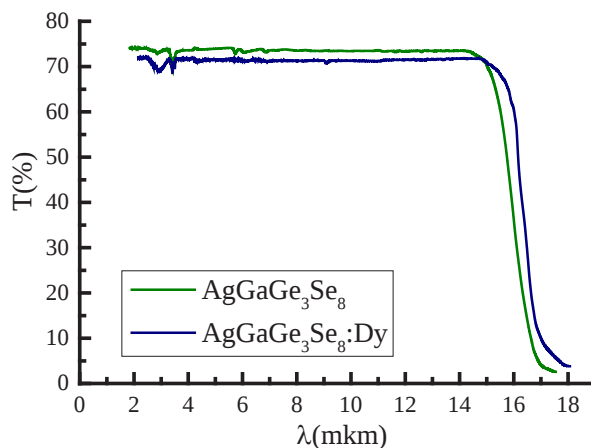


Рис. 5. Спектральний розподіл коефіцієнта пропускання

Таблиця 1

Ширина забороненої зони та параметри правила Урбаха для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ за різних температур

T, K	E_g , eV	E_u , meV	α_0 , cm^{-1}	E_o , eV	σ , відн.од.
300	2,23	74	$1.8 \cdot 10^4$	2.6	0.3494
250	2,28	67			0.3216
200	2,33	62			0.2780
150	2,38	55			0.2350
100	2,41	50			0.1724

Із спектра інфрачервоного пропускання кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$, виміряного при кімнатній температурі встановлено, що довгохвильова границя області прозорості припадає на 15–16 мкм, що визначається початком двофотонного поглинання складової компоненти GeSe_2 (Valakh, 2018). Як видно, при введенні в кристал легуючої домішки коефіцієнт пропускання зменшується у всій області прозорості без суттєвих змін в спектрах пропускання. Спостережуване зменшення прозорості, яке обумовлене додатковим поглинанням, можна пояснити, припустивши дію механізму малокутового розсіювання світла на неоднорідностях, які утворені скупченням заряджених домішок. Аналогічний результат спостерігався в кристалах $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ при легуванні їх гадолінієм (Grushka, 2000).

Відомо, область застосування напівпровідників в оптоелектроніці пов'язана з шириною забороненої зони. З огляду на це нами було проведено дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання в області краю поглинання (рис. 6а).

Кристал $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ є непрямозонним (Reshak, 2013). Для оцінювання ширини забороненої зони при непрямих E_{gi} дозволених переходах прямі $(\alpha h\nu)^{1/2} - h\nu$ екстраполювалися до $(\alpha h\nu)^{1/2}=0$ (Рис.6б). Результати оцінки ширини забороненої зони представлено в таблиці 1.

З отриманих результатів видно, що введення рідкісноземельного елемента (Dy) до $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ сприяє збільшенню ширини забороненої зони досліджуваної сполуки. На нашу

думку, це пов'язано з знаком різниць іонних радіусів компонент сполуки та заміщуючого іона ($\text{Dy}^{+3}(0.091 \text{ нм}) \rightarrow \text{Ag}^{+}(0.113 \text{ нм})$). Додатковим фактором, що впливає на зміну ширини забороненої зони, є наявність точкових дефектів (вакансій та міжвузлових атомів). Введення атомів меншого радіуса призводить до стиснення кристалічної решітки та зменшення міжатомних відстаней. Це, в свою чергу, змінює ступінь перекриття електронних орбіталей сусідніх атомів і, як наслідок, модулює ширину забороненої зони. Цей ефект підтверджується експериментами з гідростатичним стиском кристалів (Brik, 2014; Brik, 2013), які демонструють кореляцію між тиском, міжатомною відстанню і шириною забороненої зони.

Визначено температурний коефіцієнт зміни ширини забороненої зони, який становить (β): $-9 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$, що корелює зі значенням β для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ ($-8,5 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}$). Отримані результати дозволяють зробити висновок про

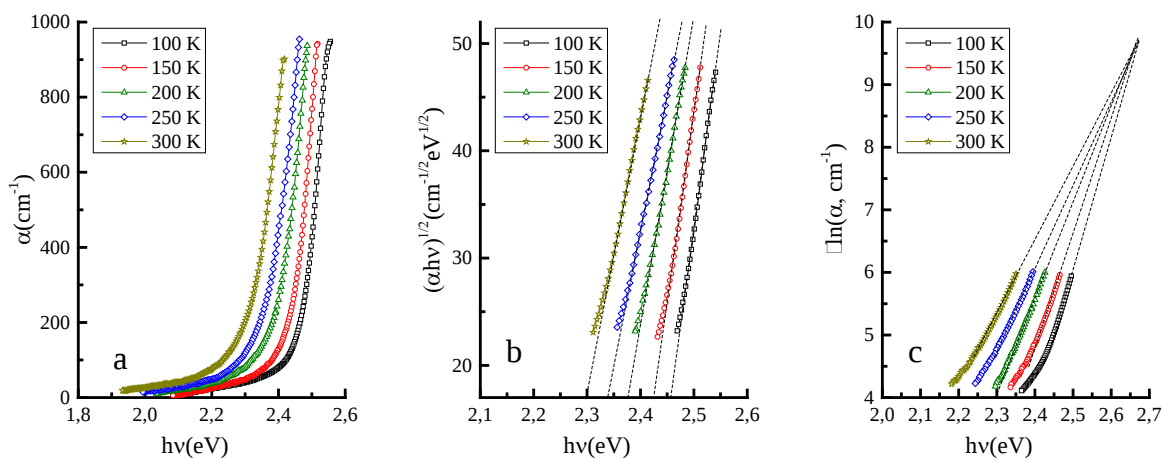


Рис. 6. Спектральний розподіл коефіцієнта поглинання кристалу $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ за різних температур: а) в координатах $\alpha - h\nu$; б) $(\alpha h\nu)^{1/2} - h\nu$; в) $\ln(\alpha) - h\nu$

єдиний механізм теплової зміни ширини забороненої зони для всіх досліджених зразків, оскільки коефіцієнти, що описують цю зміну, мають однаковий порядок.

Ключовим фактором, що визначає оптичні властивості напівпровідників, є зміна краю фундаментального поглинання при зміні температури. В аморфних і дефектних матеріалах ця зміна має характерну особливість: спектр поглинання в області краю має експоненціальний хвіст, який підпорядковується емпіричному правилу Урбаха (Urbach, 1953). З експериментальних результатів енергія Урбаха (E_U) визначена як $E_U = \Delta(h\nu) / \Delta(\ln \alpha)$, α_0 і E_0 координати точки збіжності $\ln \alpha = f(h\nu, T)$ (Рис.6с). Апроксимація спектрів поглинання за формулою Урбаха для сполуки $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$, дозволила отримати значення E_U , α_0 і E_0 , які представлені в таблиці 1. Температурну залежність енергії Урбаха визначену з експериментальних даних за співвідношенням $E_U = \Delta(h\nu) / \Delta(\ln \alpha)$ для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ представлено на рис. 7 відкритими точками.

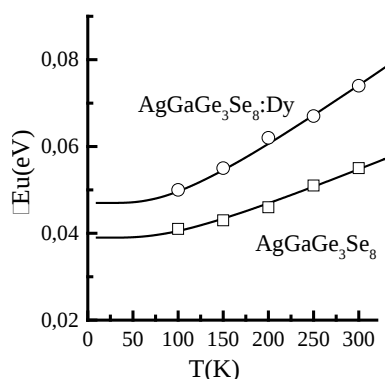


Рис. 7. Енергія Урбаха як функція від температури. Відкриті точки відповідають експериментальним даним, суцільні лінії – апроксимуючим функціям $E_u(T)$

Аналіз даних, представлених у таблиці 1 та на рисунку 7, свідчить про зростання E_U зі збільшенням температури зразків в інтервалі від 100 до 300 К. Така поведінка може бути пояснена зростанням концентрації заряджених дефектів, які при низьких температурах були нейтральними, але при нагріванні піддаються термоіонізації.

E_U можна моделювати як осцилятор Ейнштейна (Kurik, 1971), який враховує вклади динамічних (теплових) та статичних (структурних і композиційних) розупорядкувань.

Згідно цієї моделі енергія Урбаха може бути виражена співвідношенням: $E_U = A \left(\frac{1}{e^{\Theta/T} - 1} \right) + B$, де А і В – константи, пов'язані з тепловими, структурними і композиційними розладами. Θ – температура Ейнштейна, яка відповідає середній частоті фононних збуджень невзаємодіючих осциляторів. Перший доданок цього співвідношення являє собою вклад електрон-фононної взаємодії як фактор Дебая – Уоллера, а другий зумовлений середньоквадратичним відхиленням атомів від положення рівноваги, яке викликане структурним безладом від ідеально впорядкованої решітки. На рис. 7 представлено найкращу узгодженість експериментальних результатів (відкриті точки) та останнього співвідношення з регульованими параметрами А та В (суцільна лінія). Для кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ та $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ регульований параметр А становить: 25; 43 меВ, а параметр В: 39; 47 меВ відповідно. Аналіз значень параметрів А та В вказує на домінування структурних і композиційних порушень (В) у всіх досліджених зразках. Це пов'язано з їх значно більшим внеском в енергію Урбаха порівняно з термічно-індукованим безладом (А). Збільшення параметра В у легованих зразках є прямим наслідком зростання концентрації структурних дефектів, що підтверджується результатами рентгеноструктурного аналізу.

Щоб отримати оцінку значення енергії фононів, які пов'язані з хвостами Урбаха, експериментальні дані були приведені до рівняння $\sigma(T) = \sigma_0 (2kT / h\nu_0) \text{th}(h\nu_0 / 2kT)$ з σ_0 і $h\nu_0$ у якості регульованих параметрів, де $h\nu_0$ – ефективна енергія фононів, яка в більшості випадків співпадає з енергією фононів, що беруть участь в утворенні довгохвильової сторони краю поглинання; σ_0 – температурно-незалежний, але залежний від матеріалу параметр, який обернено пропорційний константі взаємодії g між електронами/екситонами і фононами за формулою $\sigma_0 = (2/3)g^{-1}$ (Kurik, 1971; Kurik, 1991). З експериментальних даних за схилами хвостів області краю власного поглинання розраховано параметр крутизни $\sigma(T) = kT \Delta(\ln \alpha) / \Delta(h\nu)$, що представлено на рис. 8 відкритими точками. Найкраще узгодження експериментальних даних із теоретичними представлено на рис. 8 суцільними лініями.

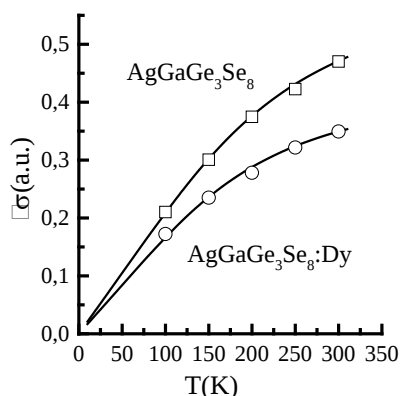


Рис. 8. Параметр крутизни σ як функція від температури. Точки відповідають експериментальним даним, суцільні лінії – апроксимуючим функціям $\sigma(T)$

Параметри апроксимації σ_0 та $h\nu_0$ для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$: 0,61 відн.од.; 50 меВ; для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$: 0,43 відн.од.; 44 меВ. Зменшення σ_0 в легованих зразках можна пов'язати із іонами Dy у вузлах Ag та збільшенням концентрації вакансій срібла, оскільки вони, як заряджені домішки, впливають на електрон-фононну взаємодію. Ефективні енергії фононів $h\nu_0$ для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ та $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ є більшими за найвищу оптичну моду в кристалі AgGaSe_2 , які становлять 276 см^{-1} (34 меВ) (Miller, 1976). Отриманий результат вказує на те, що енергія фононів $h\nu_p$, яка є вищою ніж найвища оптична мода, пов'язана зі структурними та композиційними розладами викликаними катіон-катіонним заміщенням, катіонними вакансіями, впровадженими атомами та відхиленням від стехіометрії (Abay, 2001). Аналогічний результат був отриманий при дослідженні кристалів AgGaGeS_4 та $\text{AgGaGeS}_4:\text{Er}$ (Мирончук, 2022).

Розрахована константа електрон-фононної взаємодії (g) становить 1,0929 для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ та 1,5504 для $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$. Результати

досліджень свідчать про те, що легування призводить до збільшення константи електрон-фононної взаємодії. Таке підвищення, ймовірно, зумовлене наявністю іонів диспрозію (Dy) у вузлах срібла (Ag) та зростанням концентрації вакансій у срібній підгратці. Обидва ці фактори, як заряджені домішки, впливають на електрон-фононну взаємодію, посилюючи її. Отже, при легуванні кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$ електрон-фононна взаємодія зростає. Отримані величини g типові для кристалів, які мають дефекти нестехіометрії в катіонних підрешітках (Panchenko, 1995).

Висновки. В роботі проведено дослідження кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ легованих Dy та проведений порівняльний аналіз з нелегованими зразками. Із спектра інфрачервоного пропускання кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8:\text{Dy}$, виміряного при кімнатній температурі встановлено, що довгохвильова границя області прозорості припадає на 15-16 мкм, що визначається початком двохфононного поглинання складової компоненти GeSe_2 . Встановлено, що введення рідкісноземельного елементу (Dy) до $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ сприяє збільшенню ширини забороненої зони досліджуваної сполуки. Визначена E_g становить 2,23 еВ при $T=300\text{ K}$ та 2,41 еВ при $T=100\text{ K}$. Встановлено, що робочою областю досліджуваного кристалу можна вважати діапазон від 0,6 мкм до 15 – 16 мкм. Розраховані параметри правила Урбаха та константа електрон-фононної взаємодії. Результати досліджень свідчать про те, що легування призводить до збільшення константи електрон-фононної взаємодії. Таке підвищення, ймовірно, зумовлене наявністю іонів диспрозію (Dy) у вузлах срібла (Ag) та зростанням концентрації вакансій у срібній підгратці. Обидва ці фактори, як заряджені домішки, впливають на електрон-фононну взаємодію, посилюючи її.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Kityk I.V., Majchrowski A., Ebothe J., Sahraoui B. Nonlinear optical effects in $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ nanocrystallites embedded within a photopolymer matrix. *Optics Communications*. 2004. Vol.236. P. 123–129.
2. Kulyk B., Sahraoui B., Krupka O., Kapustianyk V., Rudyk V., Berdowska E., Tkaczyk S., Kityk I. Linear and nonlinear optical properties of ZnO/PMMA nanocomposite films. *Journal Of Applied Physics*. 2009. Vol.106. 093102.
3. Sahraoui B., Czaplicki R., Klöpperpieper A., Andrushchak A. S., Kityk A. V. Ferroelectric $\text{AgNa}(\text{NO}_2)2\text{AgNa}(\text{NO}_2)2$ crystals as novel highly efficient nonlinear optical material: Phase matched second harmonic generation driven by a spontaneous and electric field induced polarizations. *Journal of Applied Physics*. 2010. J. Appl. Phys. 107, 113526.
4. Fei Liang, Lei Kang, Zheshuai Lin, and Yicheng Wu. Mid-infrared nonlinear optical materials based on metal chalcogenides: structure-property relationship. *Cryst. Growth Des.* 2017. 17, 4, 2254–2289.

5. Iliopoulos K., Kasprowicz D., Majchrowski A., Michalski E., Gindre D., Sahraoui B. Multifunctional $\text{Bi}_2\text{ZnO}_2\text{O}_6$ single crystals for second and third order nonlinear optical applications. *Applied Physics Letters*. 2013. 103. 231103.
6. Shpotyuk O.I., Kasperczyk J., Kityk I.V. Mechanism of reversible photoinduced optical effects in amorphous As_2S_3 . *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1997. 215. 218–225.
7. Abrahams S. C., Bernstein, J. L. Crystal structure of piezoelectric nonlinear-optic AgGaS_2 . *J. Chem. Phys.* 1973. 59, 1625–1629.
8. Parasyuk O.V., Fedorchuk A.O., Gorgut G.P., Khyzhun O.Y., Wojciechowski A., Kityk I.V. Crystal growth, electron structure and photo induced optical changes in novel $\text{Ag}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ($x = 0.333, 0.250, 0.200, 0.167$) crystals. *Optical materials*, 2012. Vol. 35, Is. 1. P. 65–73.
9. Grande T., Ishii M., Akaishi M., Aasland S., Fjellvag H., Stolen S. *J. Sol. State Chem.* 1999. 145. 167–173.
10. Valakh M.Y., Dzhagan V.M., Havryliuk Ye.O., Yukhymchuk V.O., Parasyuk O.V., Myronchuk G.L., Zahn D.R.T., Linvinchuk A.P. Raman Scattering Study of Mixed Quaternary $\text{Ag}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ($0.167 \leq x \leq 0.333$) Crystals. *Phys. Status Solidi*. 2018. 255, 3, p. 1700230.
11. Grushka O.G., Gorley P.M., Bestseny A.V., Grushka Z.M. Effect of doping with gadolinium on the physical properties of $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$. *Semiconductors*. 2000, Vol. 34, Is. 10, pp 1147–1150.
12. Reshak A. H., Parasyuk O. V., Fedorchuk A. O., Kamarudin H., Auluck S., and Chysk J. Optical Spectra and Band Structure of $\text{Ag}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ($x = 0.333, 0.250, 0.200, 0.167$) Single Crystals. Experiment and Theory. *J. Phys. Chem. B*. 2013. Vol. 117, № 48. P.15220–15231.
13. Brik M. G., Parasyuk O. V., Myronchuk G. L., Kityk I. V. Specific features of band structure and optical anisotropy of $\text{Cu}_2\text{CdGeSe}_4$ quaternary compounds. *Mater. Chem. Phys.* 2014. Vol. 147, № 1–2. P. 155–161.
14. Brik M. G., Kityk I. V., Parasyuk O. V., Myronchuk G. Photoinduced features of energy band gap in quaternary $\text{Cu}_2\text{CdGeSe}_4$ crystals. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2013. Vol. 25. P. 505802 (11pp).
15. Urbach F. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids. *Phys. Rev.* 1953. Vol. 92, № 5. P. 1324.
16. Kurik M. V. Urbach rule (Review). *Phys. Status Solidi A*. 1971. Vol. 8. P. 9–30.
17. Kurik M. V. Experimental evaluation of exciton-phonon interaction constant. *Fiz. Tverd. Tela*. 1991. Vol. 33. P. 615–618.
18. Miller A., Holah G. D., Dunnett W. D. Optical phonons in AgGaSe_2 / Iseler. *Phys. Rev.* 1976. Vol. 78, № 2. P. 569–576.
19. Abay B., Güder H. S., Efeoglu H., Yoğurtçu Y. K. Temperature dependence of the optical energy gap and Urbach – Martienssen's tail in the absorption spectra of the layered semiconductor $\text{Ti}_2\text{GaInSe}_4$. *J. Phys. Chem. Solids*. 2001. Vol. 62. P. 747–752.
20. Мирончук Г., Мельничук Т., Єндріка Я., Кажукаускас В. Оптичні та нелінійно-оптичні властивості кристалів AgGaGeS_4 , легованих Ер. *Фізика та освітні технології*, 2022, (1), 41–47. <https://doi.org/10.32782/pet-2022-1-5>.
21. Panchenko T., Kopylova S., Osetskii Yu. Edge absorption in $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ crystals. *Phys. Sol. State*. 1995. Vol. 37. P. 1415–1419.

REFERENCES:

1. Kityk, I.V., Majchrowski, A., Ebothe, J., & Sahraoui, B. (2004). Nonlinear optical effects in $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ nanocrystallites embedded within a photopolymer matrix. *Optics Communications*. Vol.236. P. 123–129.
2. Kulyk, B., Sahraoui, B., Krupka, O., Kapustianyk V., Rudyk V., Berdowska E., Tkaczyk S., & Kityk I. (2009). Linear and nonlinear optical properties of ZnO/PMMA nanocomposite films. *Journal Of Applied Physics*. Vol.106. 093102.
3. Sahraoui, B., Czaplicki, R., Klöpperpieper, A., Andrushchak, A. S., & Kityk, A. V. (2010). Ferroelectric $\text{AgNa}(\text{NO}_2)$ $2\text{AgNa}(\text{NO}_2)_2$ crystals as novel highly efficient nonlinear optical material: Phase matched second harmonic generation driven by a spontaneous and electric field induced polarizations. *Journal of Applied Physics*. J. Appl. Phys. 107, 113526.
4. Fei Liang, Lei Kang, Zheshuai Lin, & Yicheng Wu. (2017). Mid-infrared nonlinear optical materials based on metal chalcogenides: structure-property relationship. *Cryst. Growth Des.* 17, 4, 2254–2289.
5. Iliopoulos, K., Kasprowicz, D., Majchrowski, A., Michalski, E., Gindre, D., & Sahraoui, B. (2013). Multifunctional $\text{Bi}_2\text{ZnO}_2\text{O}_6$ single crystals for second and third order nonlinear optical applications. *Applied Physics Letters*. 103. 231103.
6. Shpotyuk, O.I., Kasperczyk, J., & Kityk, I.V. (1997). Mechanism of reversible photoinduced optical effects in amorphous As_2S_3 . *Journal of Non-Crystalline Solids*. 215. 218–225.
7. Abrahams, S. C., & Bernstein, J. L. (1973). Crystal structure of piezoelectric nonlinear-optic AgGaS_2 . *J. Chem. Phys.* 59, 1625–1629.
8. Parasyuk, O.V., Fedorchuk, A.O., Gorgut, G.P., Khyzhun, O.Y., Wojciechowski, A., & Kityk, I.V. (2012). Crystal growth, electron structure and photo induced optical changes in novel $\text{Ag}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ($x = 0.333, 0.250, 0.200, 0.167$) crystals. *Optical materials*, Vol. 35, Is. 1. P. 65–73.

9. Grande, T., Ishii, M., Akaishi, M., Aasland, S., Fjellvag, H., Stolen, S. (1999). *J. Sol. State Chem.* 145. 167–173.
10. Valakh, M.Y., Dzhagan, V.M., Havryliuk, Ye.O., Yukhymchuk, V.O., Parasyuk, O.V., Myronchuk, G.L., Zahn, D.R.T., & Linvinchuk, A.P. (2018). Raman Scattering Study of Mixed Quaternary $\text{Ag}_x\text{Ga}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ($0.167 \leq x \leq 0.333$) Crystals. *Phys. Status Solidi*. 255, 3, p. 1700230.
11. Grushka, O.G., Gorley, P.M., Bestseny, A.V., & Grushka, Z.M. (2000). Effect of doping with gadolinium on the physical properties of $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$. *Semiconductors*. Vol. 34, Is. 10, pp 1147–1150.
12. Reshak, A. H., Parasyuk, O. V., Fedorchuk, A. O., Kamarudin, H., Auluck, S., & Chysk, J. (2013). Optical Spectra and Band Structure of $\text{Ag}_x\text{Ga}_x\text{Ge}_{1-x}\text{Se}_2$ ($x = 0.333, 0.250, 0.200, 0.167$) Single Crystals. Experiment and Theory. *J. Phys. Chem. B*. Vol. 117, № 48. P. 15220–15231.
13. Brik, M. G., Parasyuk, O. V., Myronchuk, G. L., & Kityk, I. V. (2014). Specific features of band structure and optical anisotropy of $\text{Cu}_2\text{CdGeSe}_4$ quaternary compounds. *Mater. Chem. Phys.* Vol. 147, № 1–2. P. 155–161.
14. Brik M. G., Kityk I. V., Parasyuk O. V., & Myronchuk G. (2013). Photoinduced features of energy band gap in quaternary $\text{Cu}_2\text{CdGeS}_4$ crystals. *J. Phys. Condens. Matter*. Vol. 25. P. 505802 (11pp).
15. Urbach, F. (1953). The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids. *Phys. Rev.* Vol. 92, № 5. P. 1324.
16. Kurik, M. V. (1971). Urbach rule (Review). *Phys. Status Solidi A*. Vol. 8. P. 9–30.
17. Kurik, M.V. (1991). Experimental evaluation of exciton-phonon interaction constant. *Fiz. Tverd. Tela*. Vol. 33. P. 615–618.
18. Miller, A., Holah, G. D., & Dunnett, W. D. (1976). Optical phonons in AgGaSe_2 / Iseler. *Phys. Rev.* Vol. 78, № 2. P. 569–576.
19. Abay, B., Güder, H. S., Efeoglu, H., & Yoğurtçu, Y. K. (2001). Temperature dependence of the optical energy gap and Urbach – Martienssen's tail in the absorption spectra of the layered semiconductor $\text{Tl}_2\text{GaInSe}_4$. *J. Phys. Chem. Solids*. Vol. 62. P. 747–752.
20. Myronchuk, G., Melnychuk T., Yendryka Y., & Kazhukauskas V. (2022). Optychni ta nelinejno-optychni vlastyvoli krystaliv AgGaGeS_4 , lehovanykh Er. [Optical and nonlinear optical properties of Er-doped AgGaGeS_4 crystals]. *Fizyka ta osviti tekhnolohiyi – Physics and Educational Technology*, 1, 41–47. <https://doi.org/10.32782/pet-2022-1-5>. [in Ukrainian]
21. Panchenko, T., Kopylova, S., & Osetskii, Yu. (1995). Edge absorption in $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ crystals. *Phys. Sol. State*. Vol. 37. P. 1415–1419.

УДК 538.9

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-8>

Мирон РУДИШ

кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, м. Львів, Україна, 79000; науковий співробітник 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/0000-0002-5431-5652>

SCOPUS-AUTHOR ID: 55858314300

Андрій КАШУБА

доктор фізико-математичних наук, доцент кафедри загальної фізики, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандени, 12, м. Львів, Україна, 79000

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3650-3892>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

Бібліографічний опис статті: Рудиш, М., Кашуба А. (2024). Вплив гідростатичного тиску на електронну структуру кристала CuAlTe_2 . *Фізика та освітні технології*, 2, 56–64, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-8>

ВПЛИВ ГІДРОСТАТИЧНОГО ТИСКУ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ КРИСТАЛА CuAlTe_2

У цій роботі вперше проведено теоретичне дослідження структурних та фізичних властивостей кристала CuAlTe_2 під дією зовнішніх гідростатичних тисків. Для цього здійснено комплекс комп'ютерних обчислень, що включає розрахунок кристалічної структури та властивостей досліджуваного матеріалу. Структура кристала визначалась використовуючи метод Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шенно, за допомогою якого отримувались оптимізовані параметри ґратки та координат атомів. Дослідження електронних властивостей кристала і їх трансформації за дії гідростатичних тисків здійснювались шляхом моделювання з перших принципів. Для цього в рамках теорії функціоналу густини (DFT) проведено розрахунки зонно-енергетичної структури кристала $E(k)$. Обмінно-кореляційна взаємодія описувалась за допомогою узагальненого градієнтного наближення. Основна увага приділена вивченню зміни кристалографічних параметрів під тиском, що дозволяє зрозуміти особливості поведінки цього матеріалу в умовах високих тисків. У роботі застосовувались гідростатичні тиски в межах 0–5 ГПа. Результати показують, що під впливом гідростатичного тиску відбувається поступове зменшення об'єму елементарної комірки, що добре узгоджується з теоретичними передбаченнями та описується рівнянням стану Мурнагана. На основі цього рівняння визначено об'ємний модуль пружності B та його першу похідну по тиску B' , що характеризують стійкість кристала до деформацій. З'ясовано, що прикладання тиску зумовлює значну тетраедричну деформацію кристалічної ґратки CuAlTe_2 , що може впливати на його фізичні властивості, зокрема на електронну структуру. Важливо, що зростання тиску призводить до збільшення ширини забороненої зони E_g , що може бути корисним для потенційних застосувань матеріалу у напівпровідникових технологіях. Розрахунки показали, що зміна значення E_g при підвищенні тиску відповідає квадратичній залежності, що дозволяє точно описати поведінку ширини забороненої зони у діапазоні застосованих тисків. Отримані результати можуть бути корисними для подальшого застосування CuAlTe_2 у високотехнологічних приладах, де необхідні матеріали з можливістю регулювання ширини забороненої зони під впливом зовнішніх умов.

Ключові слова: халькопірит, гідростатичний тиск, зонна структура, густина станів, теорія функціоналу густини.

Myron RUDYSH

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of Experimental Physics, Ivan Franko National University of Lviv, 8 Kyrylo and Mefodii str., Lviv, Ukraine, 79000; Research Fellow 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/0000-0002-5431-5652>

SCOPUS-AUTHOR ID: 55858314300

Andrii KASHUBA

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of General Physics, Lviv Polytechnic National University, 12 Banders str., Lviv, Ukraine, 79000

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3650-3892>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

To cite this article: Rudysh, M., Kashuba A. (2024). Vplyv hidrostatychnoho tysku na elektronnu strukturu krystalu CuAlTe_2 [Influence of hydrostatic pressure on the electronic structure of the CuAlTe_2 crystal]. *Physics and Educational Technology*, 2, 56–64, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-8>

INFLUENCE OF HYDROSTATIC PRESSURE ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE CuAlTe_2 CRYSTAL

In this paper, for the first time, a theoretical study of the structural and physical properties of the CuAlTe_2 crystal under the influence of external hydrostatic pressures was carried out. For this, a complex of computer calculations was carried out, which included the calculation of the crystal structure and properties of the material under study. The crystal structure was determined using the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Schanno method, which was used to obtain optimized lattice parameters and atomic coordinates. The study of the electronic properties of the crystal and their transformation under the action of hydrostatic pressure was carried out by modeling from the first principles. For this purpose, calculations of the band-energy structure of the crystal $E(k)$ were carried out within the framework of the density functional theory (DFT). The exchange-correlation interaction was described using the generalized gradient approximation. The main attention is paid to the study of changes in crystallographic parameters under pressure, which allows us to understand the peculiarities of the behavior of this material under the influence of high pressure. Hydrostatic pressures in the range of 0–5 GPa were used in the work. The results show that under the influence of hydrostatic pressure there is a gradual decrease in the volume of the unit cell, which is in good agreement with theoretical predictions and is described by the Murnaghan equation of state. On the basis of this equation, the bulk modulus of elasticity B and its first pressure derivative B' , which characterize the crystal's resistance to deformations, are determined. It was investigated that the application of pressure causes a significant tetrahedral deformation of the CuAlTe_2 crystal lattice, which can affect its physical properties, in particular, the electronic structure. Importantly, an increase in pressure leads to an increase in the band gap E_g , which can be useful for potential applications of the material in semiconductor technology. Calculations showed that the change in the value of E_g with increasing pressure corresponds to a quadratic dependence, which allows us to accurately describe the behavior of the gap width in the range of applied pressures. The obtained results may be useful for the further application of CuAlTe_2 in high-tech devices, where materials with the ability to adjust the band gap under the influence of external conditions are needed.

Key words: chalcopyrite, hydrostatic pressure, band structure, density of states, density functional theory.

Вступ. Потрійні напівпровідникові кристали групи I-III-VI₂, де I = Cu, Ag, III = Al, Ga, In, VI = S, Se, Te, є відомими матеріалами, що походять від природнього мінерала халькопіриту – CuFeS_2 . На сьогодні відомо, що представники цієї групи є цікавими з практичної точки зору через великий коефіцієнт поглинання, прозорість у широкій спектральній області (зокрема в ІЧ ділянці спектра), відсутність центра симетрії (Honeyman, 1971; Koschel, 1975; Matsushita, 1992). Матеріали знаходять застосування в оптоелектроніці, фотовольтаїці, нелінійній

оптиці, сенсорній техніці, тощо. Зокрема їхнє використання у вигляді тонких плівок у поєднанні з оптимальною шириною забороненої зони робить їх привабливими для застосування у сонячній енергетиці (Benseddik, 2020; Kowsar, 2020) та фотокаталізі (Mondal, 2018; Regulacio, 2016). Дослідженню фізико-хімічних властивостей кристалів групи халькопіриту присвячена низка експериментальних та теоретичних робіт (Huang, 2021; Boyd, 1971; Rudysh, 2022; Rudysh, 2021; Rudysh, 2020). Відомо, що деякі матеріали цієї групи володіють фазовими переходами за

дії гідростатичного тиску, що змінює симетрію структури кристала та його властивості (Rudysh, 2022; Bovornratanarak, 2010).

Серед представників групи I-III-VI₂ цікавими і малодослідженими є кристали CuAlTe₂. Раніше у роботі (Gudelli, 2015) проводились дослідження термоелектричних властивостей кристала CuAlTe₂. З'ясовано провідні властивості Cu-вмісного халькопіриту та показано, що сполука CuAlTe₂ є більш перспективною порівняно з CuGaTe₂, що є ефективним термоелектричним матеріалом з конкурентним коефіцієнтом добротності (Gudelli, 2015). Вивченню умов росту та характеристики тонких плівок CuAlTe₂ присвячена робота (Benchouk, 1999). Структура та властивості CuAlTe₂ як буферного шару досліджено в роботі (Benchouk, 2010), а з'ясуванню впливу товщини плівки на структурні, морфологічні властивості плівок CuAlTe₂ – (Hassan, 2020). Першопринципні моделювання за високих температур здійснено в роботі (Sharma, 2014). Про особливості температурного розширення та структурні властивості системи твердих розчинів (CuAlTe₂)_{1-x}(CuAlSe₂)_x повідомляється в роботі (Korzun, 2006). Деякі пружні властивості обговорюються в роботі (Gupta, 2023), а електронна структура сполук CuAlX₂ (X = S, Se, Te) досліджувалась в роботі (Reshak, 2008).

Для практичного використання матеріалу важливим при їхньому дослідженні є з'ясування впливу дії зовнішніх чинників, таких як температура, електричне і магнітне поле, гідростатичний та одновісний тиски. У роботі проводиться теоретичне дослідження сполуки CuAlTe₂ в рамках теорії функціоналу густини за дії гідростатичних тисків. З'ясовується вплив гідростатичного тиску на структурні параметри кристала та його зонно-енергетичну структуру.

Методика розрахунків. У роботі розрахунки проводяться з використанням теорії функціоналу густини (density functional theory – DFT) (Ravindran, 1998). Моделювання здійснюється за допомогою програми CASTEP (Clark, 2005). Обмінно-кореляційні ефекти розглядалися в рамках узагальненого градієнтного наближення (generalized gradient approximation – GGA) з параметризацією у вигляді функціонала Пердью-Бурке-Ернзергофа (Perdew, 1981). Енергію відсікання базисної плоскої хвилі було обрано на рівні 450 еВ, а вибір *k*-сітки за схемою Монкхорста-Пака (Monkhorst, 1976). *k*-сітка була встановлена як 5×5×3 *k*-точок для зони Бріллюєна. Вибір *k*-сітки та значення енергії

відсікання E_{cut} здійснювався шляхом проведення тесту збіжності повної енергії кристала. Критерії збіжності були такими: повна енергія 10⁻⁵ еВ/атом, максимальна сила та напруга 0,03 еВ/Å та 0,05 ГПа відповідно, а максимальне зміщення атомів 0,001 Å. При розрахунках використовувались такі електронні конфігурації: 3d¹⁰4s¹ для Cu, 3s²3p¹ для Al та 5s²5p⁴ для Te. Моделювання впливу гідростатичного тиску на структуру і властивості кристала проводилось шляхом геометричної оптимізації кристалічної структури за значень тиску 0-5 ГПа. Для цього використано BFGS метод, що дозволяє знайти рівноважні параметри ґратки та координати атомів (Pfrommer, 1997).

Результати і обговорення. Вихідними даними для проведення розрахунків зонно-енергетичної структури сполуки CuAlTe₂ були експериментально отримані кристалографічні параметри, подані в роботі (Hahn, 1953). Згідно з цією роботою для кристала CuAlTe₂ параметри ґратки є такими: *a* = 5,976 Å, *c* = 11,804 Å, *V* = 421,551 Å³, *Z* = 4, а просторова група *I*-42d. Вигляд елементарної комірки кристала зображено на рис. 1.

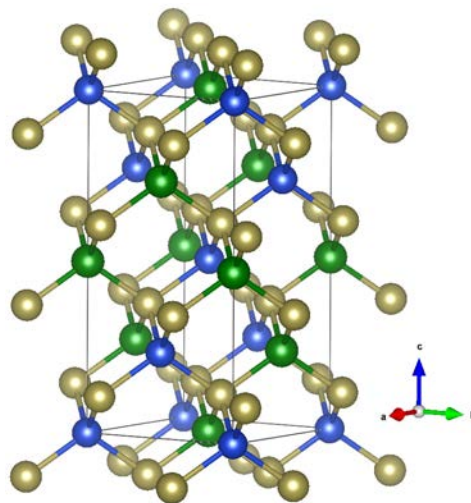


Рис. 1. Кристалічна ґратка кристала CuAlTe₂ у фазі зі структурою халькопіриту: сині кульки – атоми міді; зелені кульки – атоми алюмінію; коричневі кульки – атоми телуру

Кожен атом у структурі має чотирьох найближчі сусіди: кожен іон металу координується чотирма іонами телуру, кожен іон телуру має два найближчих сусіда Al та два Cu. Координати атомів у структурі CuAlTe₂ зібрані в таблиці 1.

Оптимізацію структури кристалічної ґратки досліджуваного матеріалу проводили

в діапазоні тисків від 0 до 5 ГПа з кроком 1 ГПа. Як видно з таблиці, експериментальна та оптимізована структури за відсутності тиску є близькими. Оптимізовані параметри ґратки є такими: $a = 6,11272 \text{ \AA}$, $c = 12,1111 \text{ \AA}$, $V = 452,535 \text{ \AA}^3$. Порівняно з експериментальними даними, оптимізовані параметри ґратки кристала є дещо завищеними (на 2,3% для параметра a , і на 2,6% для параметра c). Таке завищення для оптимізованої кристалічної структури є типовим за використання GGA і може прийматись за передбачуваний недолік цього функціонала (Rudysh, 2022; Rudysh, 2023).

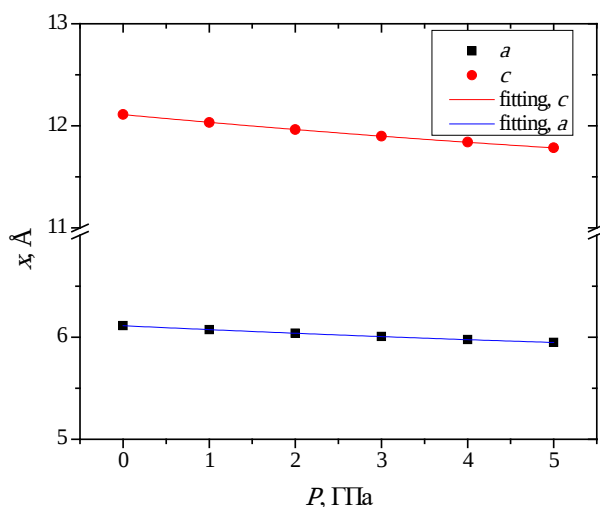


Рис. 2. Параметри кристалічної ґратки кристала CuAlTe_2 за дії гідростатичного тиску в діапазоні 0-5 ГПа

На рис. 2 зображено залежність параметрів кристалічної ґратки кристала CuAlTe_2 від величини прикладеного гідростатичного тиску P . Як видно з рисунка, застосування гідростатичного тиску в діапазоні 0-5 ГПа призводить до монотонного зменшення параметрів ґратки a та c . Розраховані параметри ґратки (позначені точками) апроксимовано функцією типу $x = x_0 + \alpha P + \beta P^2$, де x – параметр ґратки, α та β – параметри апроксимації, P – тиск. В результаті

апроксимації отримано такі рівняння: $a = 6,112 - 0,0396 P + 0,0014 P^2$ – для параметра a та $c = 12,110 - 0,0784 P + 0,026 P^2$ – для параметра c . З рівнянь видно, що параметр ґратки c зазнає дещо більшої зміни ніж параметр a . Як наслідок, зміни параметрів ґратки під дією гідростатичного тиску P відображаються в зміні об'єму кристалічної ґратки V . На рис. 3 зображено баричну залежність об'єму елементарної комірки кристала CuAlTe_2 в діапазоні тисків 0-5 ГПа. Видно, що застосування гідростатичного тиску призводить до дещо нелінійної зміни об'єму ґратки V . Варіації відносної зміни об'єму елементарної комірки V/V_0 (тут V і V_0 є об'ємом елементарної комірки за тиску P і тиску навколишнього середовища) були апроксимовані рівнянням стану Мурнагана (Brik, 2013).

$$V/V_0 = (1 + P(B'/B))^{-1/B'}, \quad (1)$$

де B та $B' = dB/dP$ є об'ємний модуль тиску та його перша похідна по тиску, відповідно. Така апроксимація є простим методом з'ясування величини пружних модулів.

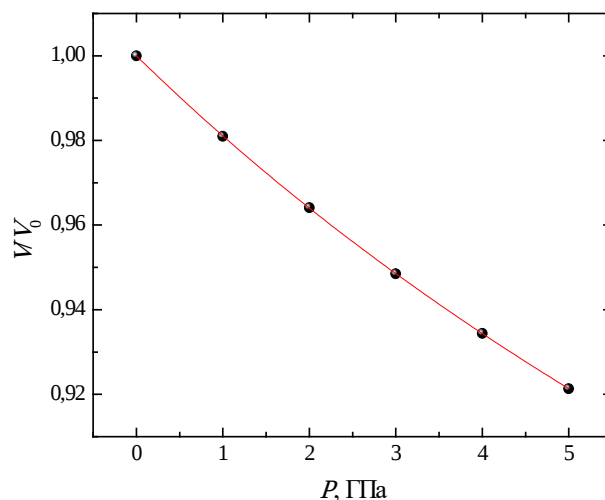


Рис. 3. Розрахована відносна зміна об'єму (зафарбовані круги), апроксимація рівняння стану Мурнагана (червона лінія) для кристала CuAlTe_2

Таблиця 1

Експериментальні (Hahn, 1953) та оптимізовані координати атомів у ґратці кристала CuAlTe_2 за $P = 0$

Атом	Експеримент (Hahn, 1953)			Оптимізація		
	x/a	y/b	z/c	x/a	y/b	z/c
Cu	0	0	0	0	0	0
Al	0	0	0,5	0	0	0,5
Te	0,25	0,25	0,125	0,243	0,25	0,125

Отримані з апроксимації рівнянням стану Мурнагана значення об'ємного модуля стиску і його перша похідна по тиску становить $B = 49,97$ ГПа та $B' = 4,73$, відповідно. У роботі (Gupta, 2023) повідомляється про значення об'ємного модуля пружності B для кристала CuAlTe_2 в межах 42-53 ГПа, що добре узгоджується з отриманим у цій роботі значення. Величина об'ємного модуля пружності є на 29 ГПа меншим за значення модуля для CuGaS_2 та приблизно на 35 ГПа менше за значення отримане для CuAlS_2 ($B = 78,5$ ГПа та $B' = 5,27$) (Brik, 2013). Мала величина об'ємного модуля пружності відповідає відносно м'якому матеріалу щодо дії гідростатичного тиску.

Оскільки матеріали даної групи володіють тетраедричною деформацією кристалічної ґратки, нами розраховано залежність параметра тетраедричної деформації η від прикладеного тиску P . Вона виникає внаслідок нееквівалентності хімічних зв'язків у структурі кристала. Цей параметр визначається як

$$\eta = c/2a. \quad (2)$$

Для ідеальної структури кристала значення параметра η рівне 1, тоді як відхилення від цього значення вказує на ступінь її деформації. З рисунка видно, що гідростатичний тиск призводить до зменшення значення коефіцієнта деформації η , що вказує на зростання структурної анізотропії досліджуваної сполуки. Це свідчить про пониження симетрії кристала, що ймовірно збільшить анізотропію його властивостей.

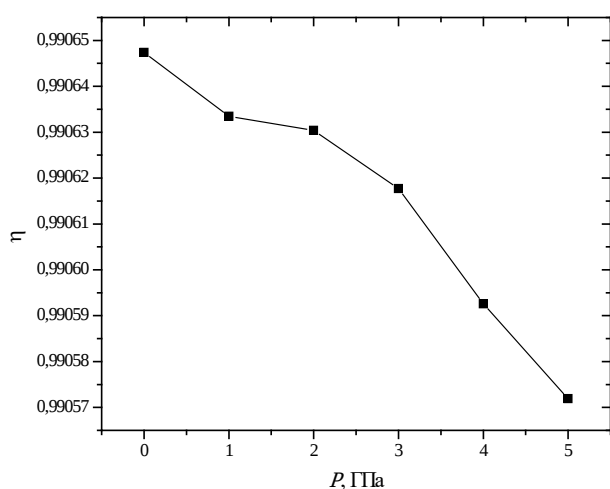


Рис. 4. Залежність параметра тетраедричної деформації η від гідростатичного тиску

Розрахована зонно-енергетична структура кристала CuAlTe_2 з використанням GGA-PBE функціонала зображено на рисунку 5 (а). Видно, що у досліджуваної сполуки ширина забороненої зони, як і в інших представників групи I-III-VI₂, є прямого типу (Rudysh, 2022; Rudysh, 2023). Вершина валентної зони та дно зони провідності розташовані у центрі зони Бріллюена (Г-точка). За відсутності гідростатичного тиску значення $E_g = 1,006$ еВ. Отримане значення є заниженим на величину приблизно 1,05 еВ порівняно з наявними експериментальними даними для досліджуваної сполуки (Reddy, 1995). Така недооцінка є типовою для GGA функціонала, однак відносна зміна фізичних величин за використання цього функціоналу може бути оцінена з доброю точністю. Застосування гідростатичного тиску не призводить до зміни типу забороненої зони (рис. 5б). Спостерігається незначна деформація зонної структури що головню виражається в зміні ширини забороненої зони та незначній деформації деяких рівнів. Зі збільшенням тиску від 0 до 5 ГПа значення E_g зростає до 1,426 еВ, що становить на приблизно 0,47%. Ці результати можна пояснити скороченням відстані між атомами при стисненні, що призводить до зміни потенціалів взаємодії.

З розрахунку зонно-енергетичної структури кристала CuAlTe_2 для різних тисків побудовано баричну залежність значення ширини забороненої зони (рис. 6). Щоб визначити коефіцієнт баричної зміни E_g , значення прямої забороненої зони апроксимовано квадратичною функцією: $E_g(P) = E_g(0) + aP + bP^2$. Отримані параметри апроксимації є такими: $E_g = 1,00418$ еВ, $a = 0,108$ еВ/ГПа, $b = -0,00473$ еВ/(ГПа)². З рівняння видно, що зміна ширини забороненої зони за дії гідростатичного тиску є близькою до лінійної з незначною параболічністю. У досліджуваного матеріалу CuAlTe_2 зміна E_g з тиском є швидшою порівняно з кристалом CuAlS_2 (Geng, 2023). Це вказує на більшу чутливість властивостей кристала CuAlTe_2 до дії гідростатичного тиску.

Висновки. У роботі проведено вивчення впливу гідростатичного тиску на зонно-енергетичну структуру кристала CuAlTe_2 в рамках теорії функціоналу густини. Отримані під час процедури геометричної оптимізації параметри ґратки добре узгоджується

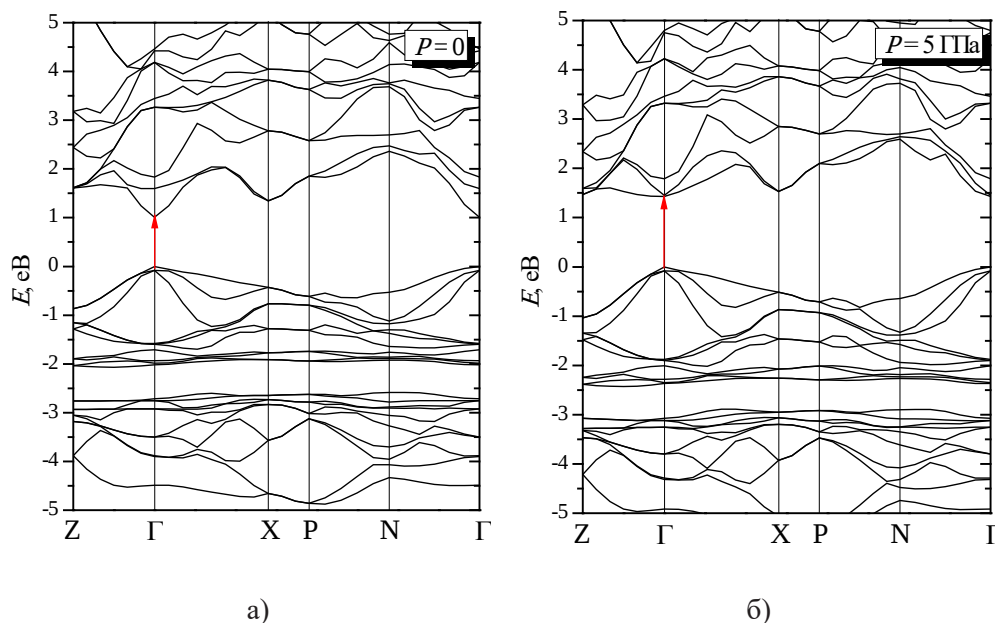


Рис. 5. Зонно-енергетична структура кристала CuAlTe_2 отримана для різних значень гідростатичного тиску: а) $P = 0$, б) $P = 5$ ГПа

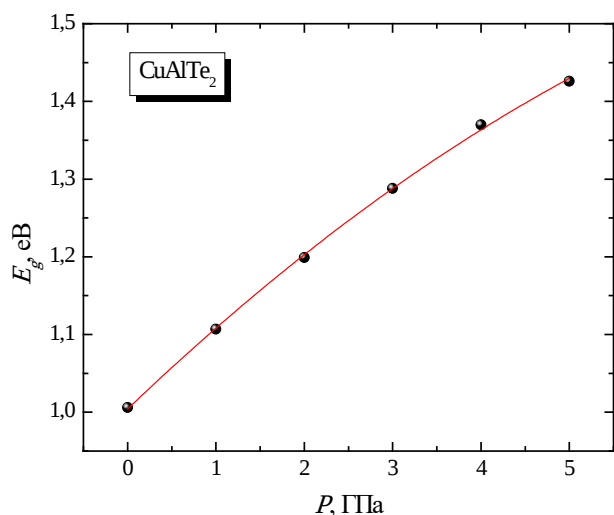


Рис. 6. Барична залежність прямої забороненої зони для кристала CuAlTe_2 в діапазоні гідростатичних тисків 0-5 ГПа

з експериментальними даними Х-променевих досліджень поданих в літературі. Розраховані параметри є дещо завищеними (на 2,3 % для параметра a та на 2,6 % для параметра c). Застосування гідростатичного тиску призводить до майже лінійної зміни параметрів ґратки

з незначною параболічністю, що може бути описане рівнянням $a = 6,112 - 0,0396 P + 0,0014 P^2$ – для параметра a та $c = 12,110 - 0,0784 P + 0,026 P^2$ – для параметра c .

З відносної зміни об'єму V/V_0 , отримано об'ємний модуль стиску B та його першу похідну по тиску B' , що становлять 49,97 ГПа та 4,73, відповідно. Показано що кристалу CuAlTe_2 є відносно м'яким матеріалом щодо гідростатичного стискування. З'ясовано, що з тиском тетраедрична деформація кристала зростає, що вказує на зростання анізотропії матеріалу в цілому.

Електронна структура кристала CuAlTe_2 є подібною до отриманої для інших матеріалів групи халькопіриту, для яких вершина валентної зони та дно зони провідності знаходиться в центрі зони Брілюєна. З'ясовано, що застосування гідростатичного тиску зумовлює зростання ширини забороненої зони кристала CuAlTe_2 . Барична залежність E_g описується рівнянням $E_g(P) = 1,00418 + 0,108P - 0,00473P^2$. Така поведінка E_g зумовлена скороченням відстані між атомами при стисненні, що призводить до зміни потенціалів взаємодії.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Honeyman W.N., Wilkinson K.H., Growth and properties of single crystals of group I-III-VI₂ ternary semiconductors, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1971. 4. P. 1182–1185.
2. Koschel W.H., Sorger F., Baars J., Optical phonons in I-III-VI₂ compounds, *J. Phys. Colloques.* 1975. 36. P. C3-177-C3-181.

3. Matsushita H., Endo S.E.S., Irie T.I.T., Raman-scattering properties of I-III-VI₂ group chalcopyrite semiconductors, *Jpn. J. Appl. Phys.* 1992. 31. P. 18.
4. Benseddik N., Belkacemi B., Boukabrine F., Ameer K., Mazari H., Boumesjed A., Benyahya N., Benamara Z., Numerical study of AgInTe₂ solar cells using SCAPS, *Advances in Materials and Processing Technologies*. 2020. P. 1–9.
5. Kowsar A., Hosen M.B., Ali M.K., Asaduzzaman M., Bahar A.N., Performance optimization of ZnS/CIGS solar cell with over 25% efficiency enabled by using a CuIn₃Se₅ OVC layer, *International Journal of Renewable Energy Research (IJRER)*. 2020. 10. P. 2000–2005.
6. Mondal G., Santra A., Jana S., Pramanik N., Mondal A., Bera P., Enhanced photocatalytic activity of ternary CuInS₂ nanocrystals synthesized from the combination of a binary Cu(I)S precursor and InCl₃, *Journal of Nanoparticle Research*. 2018. 20. P. 108.
7. Regulacio M.D., Han M.-Y., Multinary I-III-VI₂ and I₂-II-IV-VI₄ semiconductor nanostructures for photocatalytic applications, *ACS Publications*. 2016. 49. P. 511–519.
8. Huang D., Ding L., Xue Y., Guo J., Zhao Y.-J., Persson C., Interface of Sn-doped AgAlTe₂ and LiInTe₂: A theoretical model of tandem intermediate band absorber, *Appl. Phys. Lett.* 2021. 118. P. 043901.
9. Boyd G., Kasper H., McFee J., Linear and nonlinear optical properties of AgGaS₂, CuGaS₂, and CuInS₂, and theory of the wedge technique for the measurement of nonlinear coefficients, *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 1971. 7. P. 563–573.
10. Rudysh M.Ya., Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS₂ crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2022. 148. P. 106814.
11. 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.
12. Rudysh M.Ya., Piasecki M., Myronchuk G.L., Shchepanskyi P.A., Stadnyk V.Yo., Onufriv O.R., Brik M.G., AgGaTe₂ – The thermoelectric and solar cell material: Structure, electronic, optical, elastic and vibrational features, *Infrared Physics & Technology*. 2020. 111. P. 103476.
13. Bovornratanaraks T., Kotmool K., Yoodee K., McMahon M.I., Ruffolo D., High pressure structural studies of AgInTe₂, *J. Phys.: Conf. Ser.* 2010. 215. P. 012008.
14. Gudelli V.K., Kanchana V., Vaitheeswaran G., CuAlTe₂: A promising bulk thermoelectric material, *Journal of Alloys and Compounds*. 2015. 648. P. 958–965.
15. Benchouk K., El Moctar C., Bernede J.C., Marsillac S., Pouzet J., Barreau N., Emziane M., Growth and physicochemical characterization of CuAlTe₂ films obtained by reaction, induced by annealing, between Cu/Al/Te/Al/Cu... Al/Cu/Al/Te layers sequentially deposited, *Journal of Materials Science*. 1999. 34. P. 1847–1853.
16. Benchouk K., Zamallach K., Khelil A., Bernede J.C., Structural properties of ternary buffer films based upon CuAlTe₂, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2010. 13. P. 012024.
17. Hassan N.A., Khudayer I.H., Thickness effect of CuAlTe₂ thin films on morphological, structural and visual properties, *Ibn AL-Haitham Journal For Pure and Applied Sciences*. 2020. 33. P. 27–43.
18. Sharma M., Singh P., Kumari M., Verma U.P., CuAlTe₂ under high temperature: An ab initio approach, *AIP Conf. Proc.* 2014. 1591. P. 1321–1323.
19. Korzun B.V., Fadzeyeva A.A., Bente K., Schmitz W., Schorr S., Thermal expansion and structural properties of (CuAlTe₂)_{1-x}(CuAlSe₂)_x solid solutions, *Crystal Research and Technology*. 2006. 41. P. 168–173.
20. Gupta R.C., Varshney P., Mechanical stability parameters of chalcogenides and pnictides based optoelectronic materials, *Chalcogenide Letters*. 2023. 20. P. 101–112.
21. Reshak A.H., Auluck S., Electronic properties of chalcopyrite CuAlX₂ (X = S, Se, Te) compounds, *Solid State Communications*. 2008. 145. P. 571–576.
22. Ravindran P., Fast L., Korzhavyi P. A., Johansson B., Wills J., Eriksson O., Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: Application to TiSi₂, *Journal of Applied Physics*. 1998. 84. P. 4891–4904.
23. 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.
24. Perdew J.P., Zunger A., Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 1981. 23. P. 5048–5079.
25. Monkhorst H.J., Pack J.D., Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*. 1976. 13. P. 5188–5192.
26. Frommer 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.
27. Hahn H., Frank G., Klingler W., Meyer A.-D., Störger G., Untersuchungen über ternäre Chalkogenide. V. Über einige ternäre Chalkogenide mit Chalkopyritstruktur, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 1953. 271. P. 153–170.

28. Rudysh M.Ya., Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS_2 crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2022. 148. P. 106814.
29. Rudysh M.Ya., Shchepanskyi P.A., Myronchuk G.L., Piasecki M., Martyniuk O.S., Vibrational, thermodynamic and acoustic properties of AgAlS_2 crystal, *Physica B: Condensed Matter*. 2023. 654. P. 414731.
30. Brik M.G., Ma C.G., Tailoring the electronic and elastic properties by varying the composition of the $\text{CuGa}_{1-x}\text{Al}_x\text{S}_2$ chalcopyrite semiconductor, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2013. 46. P. 285304.
31. Reddy R.R., Ahammed Y.N., A study on the Moss relation, *Infrared Physics & Technology*. 1995. 36. P. 825–830.
32. Geng J., Wu J., Effects of pressure on structural, mechanical, and electronic properties of chalcopyrite compound CuAlS_2 , *Cchalcogenide Letters*. 2023. 20. P. 215–225.

REFERENCES:

1. Honeyman, W.N., & Wilkinson, K.H. (1971). Growth and properties of single crystals of group I-III-VI₂ ternary semiconductors, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 4. P. 1182–1185.
2. Koschel, W.H., Sorger, F., & Baars, J. (1975). Optical phonons in I-III-VI₂ compounds, *J. Phys. Colloques*. 36. P. C3-177-C3-181.
3. Matsushita, H., Endo, S.E.S., & Irie, T.I.T. (1992). Raman-scattering properties of I-III-VI₂ group chalcopyrite semiconductors, *Jpn. J. Appl. Phys.* 31. P. 18.
4. Benseddik, N., Belkacemi, B., Boukabrine, F., Ameer, K., Mazari, H., Boumesjed, A., Benyahya, N., & Benamara, Z. (2020). Numerical study of AgInTe_2 solar cells using SCAPS, *Advances in Materials and Processing Technologies*. P. 1–9.
5. Kowsar, A., Hosen, M.B., Ali, M.K., Asaduzzaman, M., & Bahar, A.N. (2020). Performance optimization of ZnS/CIGS solar cell with over 25% efficiency enabled by using a CuIn_3Se_5 OVC layer, *International Journal of Renewable Energy Research (IJRER)*. 10. P. 2000–2005.
6. Mondal, G., Santra, A., Jana, S., Pramanik, N., Mondal, A., & Bera, P. (2018). Enhanced photocatalytic activity of ternary CuInS_2 nanocrystals synthesized from the combination of a binary Cu(I)S precursor and InCl_3 , *Journal of Nanoparticle Research*. 20. P. 108.
7. Regulacio, M.D., & Han, M.-Y. (2016). Multinary I-III-VI₂ and I₂-II-IV-VI₄ semiconductor nanostructures for photocatalytic applications, *ACS Publications*. 49. P. 511–519.
8. Huang, D., Ding, L., Xue, Y., Guo, J., Zhao, Y.-J., & Persson, C. (2021). Interface of Sn-doped AgAlTe_2 and LiInTe_2 : A theoretical model of tandem intermediate band absorber, *Appl. Phys. Lett.* 118. P. 043901.
9. Boyd, G., Kasper, H., & McFee, J. (1971). Linear and nonlinear optical properties of AgGaS_2 , CuGaS_2 , and CuInS_2 , and theory of the wedge technique for the measurement of nonlinear coefficients, *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 7. P. 563–573.
10. Rudysh, M.Ya. (2022). Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS_2 crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 148. P. 106814.
11. 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 $\text{CuGa}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_2$ solid solutions, *Computational Materials Science*. 196. P. 110553.
12. Rudysh, M.Ya., Piasecki, M., Myronchuk, G.L., Shchepanskyi, P.A., Stadnyk, V.Yo., Onufriv, O.R., & Brik, M.G. (2020). AgGaTe_2 – The thermoelectric and solar cell material: Structure, electronic, optical, elastic and vibrational features, *Infrared Physics & Technology*. 111. P. 103476.
13. Bovornratanaraks, T., Kotmool, K., Yoodee, K., McMahon, M.I., & Ruffolo, D. (2010). High pressure structural studies of AgInTe_2 , *J. Phys.: Conf. Ser.* 215. P. 012008.
14. Gudelli, V.K., Kanchana, V., & Vaitheeswaran, G. (2015). CuAlTe_2 : A promising bulk thermoelectric material, *Journal of Alloys and Compounds*. 648. P. 958–965.
15. Benchouk, K., El Moctar, C., Bernede, J.C., Marsillac, S., Pouzet, J., Barreau, N., Emziane, M. (1999). Growth and physicochemical characterization of CuAlTe_2 films obtained by reaction, induced by annealing, between $\text{Cu}/\text{Al}/\text{Te}/\text{Al}/\text{Cu} \dots \text{Al}/\text{Cu}/\text{Al}/\text{Te}$ layers sequentially deposited, *Journal of Materials Science*. 34. P. 1847–1853.
16. Benchouk, K., Zamallah, K., Khelil, A., & Bernede, J.C. (2010). Structural properties of ternary buffer films based upon CuAlTe_2 , *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 13. P. 012024.
17. Hassan, N.A., & Khudayer, I.H. (2020). Thickness effect of CuAlTe_2 thin films on morphological, structural and visual properties, *Ibn AL-Haitham Journal For Pure and Applied Sciences*. 33. P. 27–43.
18. Sharma, M., Singh, P., Kumari M., & Verma, U.P. (2014). CuAlTe_2 under high temperature: An ab initio approach, *AIP Conf. Proc.* 1591. P. 1321–1323.
19. Korzun, B.V., Fadzeyeva, A.A., Bente, K., Schmitz, W., & Schorr, S. (2006). Thermal expansion and structural properties of $(\text{CuAlTe}_2)_{1-x}(\text{CuAlSe}_2)_x$ solid solutions, *Crystal Research and Technology*. 41. P. 168–173.

20. Gupta, R.C., & Varshney, P. (2023). Mechanical stability parameters of chalcogenides and pnictides based optoelectronic materials, *Chalcogenide Letters*. 20. P. 101–112.
21. Reshak, A.H., & Auluck, S. (2008). Electronic properties of chalcopyrite CuAlX_2 ($X = \text{S, Se, Te}$) compounds, *Solid State Communications*. 145. P. 571–576.
22. Ravindran, P., Fast, L., Korzhavyi, P. A., Johansson, B., Wills, J., & Eriksson, O. (1998). Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: Application to TiSi_2 , *Journal of Applied Physics*. 84. P. 4891–4904.
23. 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.
24. Perdew, J.P., & Zunger, A. (1981). Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Phys. Rev. B*. 23. P. 5048–5079.
25. Monkhorst, H.J., & Pack, J.D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*. 13. P. 5188–5192.
26. 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.
27. Hahn, H., Frank, G., Klingler, W., Meyer, A.-D., & Störger, G. (1953). Untersuchungen über ternäre Chalkogenide. V. Über einige ternäre Chalkogenide mit Chalkopyritstruktur, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 271. P. 153–170.
28. Rudysh, M.Ya. (2022). Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS_2 crystal under hydrostatic pressure, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 148. P. 106814.
29. Rudysh, M.Ya., Shchepanskyi, P.A., Myronchuk, G.L., Piasecki, M., & Martyniuk, O.S. (2023). Vibrational, thermodynamic and acoustic properties of AgAlS_2 crystal, *Physica B: Condensed Matter*. 654. P. 414731.
30. Brik, M.G., & Ma, C.G. (2013). Tailoring the electronic and elastic properties by varying the composition of the $\text{CuGa}_{1-x}\text{Al}_x\text{S}_2$ chalcopyrite semiconductor, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 46. P. 285304.
31. Reddy, R.R., & Ahammed, Y.N. (1995). A study on the Moss relation, *Infrared Physics & Technology*. 36. P. 825–830.
32. Geng, J., & Wu, J. (2023). Effects of pressure on structural, mechanical, and electronic properties of chalcopyrite compound CuAlS_2 , *Chalcogenide Letters*. 20. P. 215–225

УДК 37: 5 (477)

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-9>

Олександр ТИМОЩУК

кандидат педагогічних наук, здобувач ступеня доктора наук за спеціальністю «011 Освітні, педагогічні науки», Рівненський державний гуманітарний університет, вул. Пластова, 31, м. Рівне, Україна, 33000

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4367-4692>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57222627576

Бібліографічний опис статті: Тимошук, О. (2024). Теоретико-методологічні основи радіаційної освіти в закладах вищої освіти. *Фізика та освітні технології*, 2, 65–70, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-9>

ТЕОРЕТИКО-МЕТОДОЛОГІЧНІ ОСНОВИ РАДІАЦІЙНОЇ ОСВІТИ В ЗАКЛАДАХ ВИЩОЇ ОСВІТИ

В статті досліджено актуальність радіаційної освіти в умовах підвищення ядерної загрози через військову агресію та зростання використання атомної енергії в мирних цілях. Наголошено на необхідності підвищення рівня радіаційної грамотності населення, особливо у вищих навчальних закладах, щоб підготувати фахівців до можливих радіаційних загроз.

Аналіз міжнародних досліджень підтверджує важливість розвитку радіаційної освіти, яка охоплює наукове розуміння природи радіації, оцінку ризиків та практичні навички з превенції та профілактики. Більшість сучасних досліджень зосереджена на розробці методик навчання та створенні навчальних програм. Виявлено дефіцит досліджень, присвячених розробці комплексних підходів до радіаційної освіти, особливо в контексті пост аварійних ситуацій. Представлене дослідження аналізує існуючі дослідження та підкреслює необхідність розробки інтегрованих програм, що включають як формальні, так і неформальні методи навчання, з використанням сучасних цифрових технологій.

Мета статті полягає в обґрунтуванні теоретико-методологічних основ радіаційної освіти в закладах вищої освіти.

Обґрунтовано й доведено, основними дидактичними принципами цієї освіти є науковість, доступність, системність, наступність, проблемність, свідомість та активність. В якості оптимізаційних підходів до радіаційної освіти розкрито потенціал міждисциплінарного й трансдисциплінарного підходів, які сприяють якісному обґрунтуванню змісту навчання, відбору ефективних форм, методів та засобів. Запропоновано методичні підходи, які можуть бути адаптовані до конкретних навчальних цілей та аудиторії. Вибір оптимального методу вимагає врахування таких факторів, як рівень підготовки студентів, наявність матеріально-технічної бази та специфіка навчальної програми.

Подальші дослідження радіаційної освіти вбачаються в системному обґрунтуванні змістового наповнення навчальних дисциплін.

Ключові слова: радіаційна освіта, радіаційна грамотність, радіаційна безпека, заклад вищої освіти, принципи навчання, форми, методи та засоби радіаційної освіти.

Oleksandr TYMOSHCHUK

Candidate of Pedagogical Sciences, Doctor of Science (speciality '011 Educational, Pedagogical Sciences') Rivne State University of the Humanities, 31 Plastova St., Rivne, Ukraine, 33000

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4367-4692>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57222627576

To cite this article: Tymoshchuk, O. (2024). Teoretyko-metodolohichni osnovy radiatsiinoi osvity v zakladakh vyshchoi osvity [Theoretical and methodological foundations of radiation education in higher education institutions]. *Physics and Educational Technologies*, 2, 65–70, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-9>

THEORETICAL AND METHODOLOGICAL FOUNDATIONS OF RADIATION EDUCATION IN HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS

The article examines the relevance of radiation education in the context of the growing nuclear threat due to military aggression and the growing use of nuclear energy for peaceful purposes. The author emphasises the need to increase the level of radiation literacy of the population, especially in higher education institutions, in order to prepare specialists for possible radiation threats.

The analysis of international studies confirms the importance of developing radiation education, which includes scientific understanding of the nature of radiation, risk assessment and practical skills in prevention and control. Most current research focuses on the development of teaching methods and curricula. It was found that there is a lack of research on the development of integrated approaches to radiation education, especially in the context of post-accident situations. The present study analyses the existing research and emphasises the need to develop integrated programmes that include both formal and non-formal teaching methods using modern digital technologies.

The purpose of the article is to substantiate the theoretical and methodological foundations of radiation education in higher education institutions.

It has been substantiated and proved that the main didactic principles of this education are scientific, accessible, systematic, continuity, problematic, consciousness and activity. The potential of interdisciplinary and transdisciplinary approaches to radiation education is revealed as optimisation approaches to radiation education, which contribute to the qualitative substantiation of the content of training, selection of effective forms, methods and means. Methodological approaches that can be adapted to specific learning objectives and audience are proposed. The choice of the optimal method requires taking into account such factors as the level of students' training, the availability of material and technical resources, and the specifics of the curriculum.

Further research in radiation education is seen in the systematic substantiation of the content of academic disciplines.

Key words: radiation education, radiation literacy, radiation safety, higher education institution, principles of education, forms, methods and means of radiation education.

Аналіз проблеми. В сучасному високо-технологічному просторі використання енергії атомного ядра в мирних цілях генерації електроенергії, наукових досліджень, медичного діагностування й лікування перманентно зростає з кожним днем. Водночас військова агресія проти нашої держави підвищує рівень ядерної загрози для суспільства й вимагає від нього значно вищого рівня обізнаності щодо радіаційних небезпек, способів їх превенції й профілактики. З огляду на це, необхідними для обґрунтування є підходи загальної підготовки населення з основ радіаційної безпеки (РБ), що дозволить не лише збільшити рівень радіаційної грамотності (РГ), але й підвищити готовність до реагування на можливі радіаційні загрози.

«Радіаційна освіта» (РО) становить собою новий концепт у вітчизняній науково-педагогічній сфері, який акцентує увагу на формуванні системи знань, умінь і навичок, необхідних для адекватного сприйняття, оцінки та реагування на радіаційні ризики. Міжнародні дослідження свідчать про те, що цей концепт (*англ. radiation education*) широко досліджувався і має ряд науково-змістових обґрунтувань: «РО широкої громадськості має на меті забезпечити людей базовими знаннями про природу радіації, її джерела, вплив на організм людини та способи захисту від неї» (Sadigh, Khan, Kassim, Applegate, 2014); «загальна РО є комплексом формування теоретичних знань й практичних навичок для підготовки широкого кола фахівців, для забезпечення РБ» (Liang, Zhang, Gao, Hou, 2024); РО охоплює розвиток критичного оцінювання інформації

про радіацію на основі знань з фізики, хімії та інших дисциплін, з метою формування адекватного сприйняття радіаційних ризиків (Eijkkelhof, 1999). Закордонні дослідження підкреслюють, що РО має не лише інформувати населення про небезпеки радіації, але й розвивати критичне мислення та здатність до самостійного аналізу інформації про потенційні загрози.

Загальна РО населення потребує комплексного вирішення на усіх рівнях освітньої системи. Водночас одним із слушних періодів забезпечення належної підготовки з РБ є навчання у закладах вищої освіти (ЗВО). В сучасних умовах така освіта є загальнобов'язковою для усіх фахівців без виключення, не обмежуючись вузькоспеціалізованими фахівцями, котрі потенційно можуть стикатися у майбутній професійній діяльності з джерелами іонізуючого випромінювання.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Велика кількість публікацій свідчить про значний інтерес дослідників до проблем РО, однак більшість з них зосереджена на розробці ефективних методик навчання, створенні навчальних програм та оцінці рівня знань населення щодо радіаційних ризиків. У статті М. Tsubokura, Y. Kitamura висвітлюються підходи поставарійної РО (АЕС Фукусіма), які ґрунтуються на глибокому вивченні природи радіації, дозиметрії та безпечному харчуванні в умовах радіоактивних забруднень (Tsubokura, Kitamura, 2018). Також групою болгарських дослідників виконане дослідження щодо інтеграції системи РО в програми загальноосвітніх шкіл, які проживають в 30-кілометровій зоні АЕС «Козлодуй».

Дослідження передбачало апробацію у трьох варіантах: факультативне навчання, проведення семінарів і дискусійних уроків, корекція навчального плану з фізики (кожен зі способів засвідчив відносно однакову ефективність) (Kostadinova, Boyanova, Tsakovski, & Pavlova, 2004). Як бачимо, такі дослідження акцентовані на групах населення, котрі стали жертвами радіаційних аварій або можуть потенційно бути у їх ролі. Необхідно відзначити, що для забезпечення ефективної РО необхідний комплексний підхід, який охоплює як розробку навчальних програм, так і створення інформаційних та цифрових засобів.

Особливої уваги заслуговують дослідження, присвячені розробці інноваційних методів навчання РГ. Зокрема О. Нола пропонує нові форми навчання РГ, а саме: онлайн-курси та платформи дистанційного навчання, мультимедіа, віртуальні лабораторії, гейміфікація та співпраця через міжнародні освітні мережі (Нола, 2012). У іншій публікації представлена низка методів для підвищення рівня РО, орієнтованих на глибинному розумінні ризиків низьких доз радіації. Зокрема автори доводять необхідність вивчення радіаційних ризиків через соціально-наукові питання, завдяки чому здобувачі вивчають не тільки наукові концепції, але й соціальні та етичні аспекти, пов'язані з радіацією (Wojcik, 2015). О. Handan та В. Тауфун доводять ефективність інтерактивного навчання радіаційних ризиків та використання реальних прецедентів та навчальних кейсів (Handan, Taufun, 2018).

Більш комплексно проблему радіаційної освіти представляють у своєму дослідженні J. Hudzietzová та J. Sabol, головним акцентом якого є те, що освіта може допомогти уникнути важких страхів, пов'язаних з радіацією, шляхом надання чіткої, науково обґрунтованої інформації усім верствам населення. Також вони наголошують на необхідності забезпечення безперервної РО шляхом формальних чи неформальних способів (Hudzietzova, Sabol, 2014).

Практично не розробленою залишається проблема обґрунтування чітких теоретичних підходів до РО в умовах ЗВО, досить фрагментарними є наукові розвідки у сфері методичної оптимізації вивчення радіаційних ризиків.

Окремі спроби дослідження РО в умовах університету проводили А. Slechta та J. Reagan,

визначили кореляцію змісту навчання між професійною підготовкою (професією) та необхідним рівнем радіаційної підготовки. Однак у більшості випадків питання РО представлені у дослідженнях, що стосуються медичних фахівців чи персоналу ядерноенергетичного комплексу (Slechta, Reagan, 2008).

Відтак недостатня розробленість теоретико-методологічних основ загальної РО в ЗВО України, особливо в контексті зростання ядерної загрози та необхідності формування РГ населення, є актуальною проблемою, що потребує комплексного наукового обґрунтування.

Мета статті полягає в обґрунтуванні теоретико-методологічних основ радіаційної освіти в закладах вищої освіти.

Виклад основного матеріалу дослідження. Історія теоретичних основ РО бере свій початок з робіт R. Herold, опублікованих у 1969 році. На його погляд, навчання про радіацію необхідно організовувати у максимально доступній формі, опановуючи фізичні властивості радіації, зокрема про іонізаційне випромінювання (альфа, бета, гамма), його джерела та застосування в науці та повсякденному житті (Herold, 1969). Тобто РО насамперед має забезпечуватися з урахуванням принципів доступності, науковості та природовідповідності. М. Alyassin обґрунтовує теорію поведінкового підходу до РО, який сприяє розвитку практичних навичок (Alyassin, 2022). V. Dedgaonkar і D. Bhagwat наголошують на важливості проблемного підходу до освіти про радіацію (Dedgaonkar, Bhagwat, 2022).

На перший погляд, РО ґрунтується на загальнодидактичних підходах навчання, що притаманні природничим дисциплінам. Однак, враховуючи інтерпретації представлені в проаналізованих джерелах, РО має охоплювати соціальні, етичні й деякій мірі історичні (ретроспективні) аспекти. На нашу думку, РО передусім, має відповідати таким дидактичним принципам:

– *принцип науковості* полягає в тому, що навчальний процес має базуватися на сучасних об'єктивних наукових знаннях у сфері радіації. Таким чином освіта ґрунтуватиметься на перевірених фактах, що сприятиме глибокому розумінню досліджуваного змісту та мінімізації маніпулятивним впливам;

– *принцип доступності* передбачає, що зміст, навчальні матеріали та методичні підходи мають

бути доступними для усіх здобувачів, незалежно від рівня їхньої попередньої підготовки, соціального статусу чи фізичних особливостей;

– *принцип системності й наступності* забезпечує планованість й безперервність РО, шляхом послідовного й систематичного засвоєння знань;

– *принцип проблемності* полягає в орієнтації РО на вивчення чи розв'язанні реальних проблем та завдань, через аналіз кейсів та пошук стратегій поведінки в умовах радіаційних ризиків;

– *принцип свідомості й активності* націлений на активну участь здобувачів освіти в навчальному процесі, розвитку цінностей та свідомості з питань радіаційного захисту, а також формування критичного мислення.

Зазначені принципи є теоретичним базисом організації РО в умовах навчального середовища ЗВО. Передусім вони акцентовані на організацію РО здобувачів широкого загалу на базовому рівні. Зазначені принципи не повною мірою відображають особливості навчання майбутніх фахівців, що використовують у своїй діяльності джерела іонізуючого випромінювання, їх (принципи) доцільно застосовувати для формування базової РГ.

Теоретичні основи РО ґрунтуються на актуальності наукових знань, критичному мисленні (аналізі), етичних аспектах, інклюзивності, трансдисциплінарності, рефлексії, цінностях та застосуванні отриманих навичок на практиці. Лейтмотив полягає у збалансованому поєднанні складних у сприйнятті змістових парадигм РО з новітніми й традиційними методичними, цифровими та організаційними підходами, задля створення сприятливих умов для формування РГ здобувачів вищої освіти.

РО вимагає чіткого методологічного обґрунтування для ефективного й гармонійного поєднання змісту, форм та методів навчання, з урахуванням належної організаційної структури процесу навчання. Зазначимо, що «методологія – це вчення про структуру, логіку організації, принципи побудови, форми, засоби й способи наукового пізнання» (Курлянд, 2007).

РО в умовах ЗВО складний, багатоаспектний процес, який вимагає чіткої структури й послідовності, із застосуванням різних методів та засобів навчання. Роль РО у вищій школі (крім спеціальностей тісно пов'язаних з ядерними та радіаційними технологіями) полягає

у формуванні базового рівня РГ. Вивчення змісту з РБ в умовах відсутності спеціалізованих курсів стикається з певними, на перший погляд, складностями, через індивідуальність освітніх програм з підготовки фахівців у кожному університеті. Одним із способів інтеграції РО в освітній процес вищої школи за відсутності спеціалізованих навчальних дисциплін є міждисциплінарний підхід. Залежно від структури підготовки фахівців, доцільно впроваджувати радіаційні аспекти в зміст суміжних курсів, як-от безпека життєдіяльності, охорона праці, цивільна безпека, екологія, фізика, хімія, звертаючи увагу при цьому на практичному застосуванні навичок щодо радіаційних ризиків. *Міждисциплінарний підхід* передбачає інтеграцію змісту з різних наук (дисциплін) для забезпечення комплексного розуміння природи іонізуючого випромінювання та пов'язаних з ним явищ. Всупереч досить значному дидактичному потенціалу міждисциплінарності існують певні ризики застосування такого підходу в РО, а саме поверхневе вивчення дисциплін, яке ґрунтується виключно на суміжних змістових компонентах, а також складнощі у координації роботи викладацького складу.

За такої ситуації, вбачаємо більш ефективним трансдисциплінарний підхід до РО. Трансдисциплінарність в освіті розглядається як підхід, що виходить за межі традиційних дисциплінарних рамок, створюючи нові взаємозв'язки між різними галузями знань (Padurean, Cheveresan, 2010). Тобто вивчення аспектів РО розглядається як ключовий компонент, а дисципліни в межах яких він забезпечується є другим. Наприклад, проблема підвищення РГ молоді може бути вирішена шляхом залучення науковців, активістів, політиків і громадян, створюючи нові підходи до вирішення сучасних викликів. Послугуючись цим підходом зміст РО можна розглядати в рамках будь якої навчальної дисципліни. Трансдисциплінарний підхід у РО заснований на інтеграції змісту не лише з різних наукових дисциплін, але й з гуманітарних, соціальних та навіть мистецьких сфер, що сприяє виходу за межі традиційного наукового дискурсу та створити більш цілісне уявлення про радіацію, її вплив на суспільство та способи управління радіаційними ризиками.

Разом з тим можна не лише інтегрувати зміст РО в навчальні дисципліни, але

Таблиця 1

Методичні аспекти радіаційної освіти в закладі вищої освіти

№ з/п	Тема	Методи/форми навчання	Реалізація
1	Основи ядерної/радіаційної фізики	Лекції, практичні заняття, лабораторні роботи, комп'ютерне моделювання	Інтегровані курси, гуртки, онлайн-курси, стажування, проекти, стимуляційні ігри
2	Радіаційна безпека	Тренінги, симуляції аварійних ситуацій, відвідування радіаційних об'єктів, кейс-метод	
3	Вплив радіації на здоров'я людини	Лекції, практичні заняття, лабораторні роботи, аналіз наукової літератури	
4	Радіоекологія	Аналіз екологічних даних	
5	Управління радіаційними ризиками	Семінари, дискусії, розробка планів реагування на аварії	

й застосовувати потенціал неформальної освіти. Особливого потенціалу неформальна освіта набуває в умовах цифрового освітнього середовища, шляхом використання онлайн-курсів, тренінгів, та інших форм цифрової самоосвіти (Глінчук, 2014). Передусім неформальний підхід дозволяє забезпечити студентоцентризм через такі механізми оптимізації як-от: індивідуалізація (адаптація змістового наповнення та темпів освоєння матеріалу), мотивація (залучення здобувачів освіти до різних опитувань, проектів, квестів), комунікація (можливість інтенсивного обміну досвідом та знаннями). Однак варто розуміти, що неформальна освіта є доповненням до традиційних форм навчання у вищій школі. Вона сприяє формуванню глибоких і стійких знань, розвитку практичних навичок та формуванню відповідального ставлення до проблем безпеки, однак як самодостатній інструмент мало ефективна в контексті РО.

В сучасних реаліях, РО – це комплексний процес, спрямований на формуванні системних когнітивних структур про фізичні основи радіаційних явищ, принципи РБ, розвиток компетентностей для оцінки радіаційних ризиків та забезпечення безпечного використання радіаційних технологій у повсякденному житті та професійній діяльності, ґрунтуючись на чітких та глибоких особистісно-аксіологічних орієнтирах. Такий процес вимагає злагодженої організаційно-методичної підтримки, як передбачає

відбір оптимальних форм, методів та засобів навчання. В таблиці 1 представлені рекомендовані методичні підходи вивчення різних тем РО в умовах ЗВО..

Варто підкреслити, що наведений перелік носить виключно рекомендаційний характер, вибір конкретних форм і методів навчання в галузі РБ є індивідуальним для кожного випадку і залежить від багатьох чинників, а саме: рівень підготовки здобувачів й викладачів, матеріально-технічна підтримка, специфіка навчальної дисципліни, мотивація та інтереси в академічних групах тощо.

Висновки й перспективи подальших досліджень. Проведений аналіз наукової літератури та сучасного стану РБ в Україні свідчить про актуальність та необхідність загальнообов'язкової РО в ЗВО. Теоретико-методологічне обґрунтування засвідчило, що РО базується на таких принципах як науковість, доступність, системність, наступність, проблемність, свідомість та активність, а також передбачає використання різноманітних методів і форм навчання. Ефективність навчання можна підвищити за допомогою міждисциплінарного та трансдисциплінарного підходів., валідність використання яких залежить від дидактичної мети кожного конкретного змістового модуля чи заняття. Перспективним напрямком подальших досліджень вбачаємо в деталізованому обґрунтуванні змістового наповнення дисциплін з урахуванням представлених принципів та підходів.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Глінчук Ю. О. Аспекти охорони праці при використанні інформаційних технологій у освітньому середовищі. *Оновлення змісту, форм та методів навчання і виховання в закладах освіти*, 2014, № 8. С. 34–37.
2. Педагогіка вищої школи : навч. посіб. / З. Н. Курлянд, Р. І. Хмелюк, А. В. Семенова та ін. 3-є вид., перероб. і доп. Київ : Знання, 2007. 495 с.

3. Alyassin M. Applying Behavioral Learning Theory to Radiation Protection Education. *Radiologic Technology*. 2022. 93(4). С. 410–417.
4. Dedgaonkar V. G., Bhagwat D. A. Radiation education in India: current status. 2022.
5. Eijkkelhof H. M. C. Radiation risk and science education. *Radiation protection dosimetry*. 1999. 68(3-4). С. 273–278.
6. Handan O. E., Tayfun B. Ü. K. E. The effect of education on radiation risk perception of high school students. 2018.
7. Herold R. W. Radiation and Science Education. *Science Activities*. 1969. 2(4), С. 48–51.
8. Holá O. New Forms of Education in the Field of Radiation Protection. In *DIVAI 2012* (p. 127).
9. Hudzietzová J., Sabol J. Education of the public about radiation protection. *International Research Journal of Public and Environmental Health*. 2014.
10. Kostadinova B., Boyanova L., Tsakovski S., Pavlova P. Implementation of radioecological education in secondary school by a Radiation and man's elective course. 2004.
11. Liang T., Zhang C., Gao F., Hou G. Evaluation of Novel General Education Courses on Radiation Protection for Undergraduates. *Health Physics*. 2024. 127(4), С. 543–548.
12. Padurean A., Cheveresan C. T. Transdisciplinarity in education. *Journal Plus Education/Educația Plus*. 2010. 6(1).
13. Sadigh G., Khan R., Kassin M. T., Applegate K. E. Radiation safety knowledge and perceptions among residents: a potential improvement opportunity for graduate medical education in the United States. *Academic radiology*. 2014. 21(7), С. 869–878.
14. Slechta A. M., Reagan J. T. An examination of factors related to radiation protection practices. *Radiologic technology*. 2008. 79(4), С. 297–305.
15. Tsubokura M., Kitamura Y., Yoshida M. Post-Fukushima radiation education for Japanese high school students in affected areas and its positive effects on their radiation literacy. *Journal of radiation research*. 2018. 59(suppl_2), С. 65–74.
16. Wojcik A., Hamza K., Lundegård I., Enghag M., Haglund K., Arvanitis L., Schenk L. Educating about radiation risks in high schools: towards improved public understanding of the complexity of low-dose radiation health effects. *Radiation and Environmental Biophysics*. 2015. 58, 13–20.

REFERENCES:

1. Hlinchuk, Yu. O. (2014). Aspekty okhorony pratsi pry vykorystanni informatsiinykh tekhnolohii u osvithomu seredovyschi [Aspects of labour protection when using information technologies in the educational environment]. *Onovlennia zmistu, form ta metodiv navchannia i vykhovannia v zakladakh osvity*, (8), 34–37 [in Ukrainian].
2. Kurliand, Z. N., Khmeliuk, R. I., Semenova, A. V., & [inshi avtory]. (2007). *Pedahohika vyshchoi shkoly* (3-tie vyd., pererob. i dop.) [Pedagogy of Higher Education (3rd edition, revised and supplemented)]. Kyiv: Znannia.
3. Alyassin, M. (2022). Applying Behavioral Learning Theory to Radiation Protection Education. *Radiologic Technology*, 93(4), 410–417.
4. Dedgaonkar, V. G., & Bhagwat, D. A. (1999). Radiation education in India: current status.
5. Eijkkelhof, H. M. C. (1996). Radiation risk and science education. *Radiation protection dosimetry*, 68(3-4), 273–278.
6. Handan, O. E., & Tayfun, B. Ü. K. E. (2018). The effect of education on radiation risk perception of high school students.
7. Herold, R. W. (1969). Radiation and Science Education. *Science Activities*, 2(4), 48–51.
8. Holá, O. (2012, April). New Forms of Education in the Field of Radiation Protection. In *DIVAI 2012* (p. 127).
9. Hudzietzová, J., & Sabol, J. (2014). Education of the public about radiation protection. *International Research Journal of Public and Environmental Health*.
10. Kostadinova, B., Boyanova, L., Tsakovski, S., & Pavlova, P. (2004). Implementation of radioecological education in secondary school by a Radiation and man's elective course.
11. Liang, T., Zhang, C., Gao, F., & Hou, G. (2024). Evaluation of Novel General Education Courses on Radiation Protection for Undergraduates. *Health Physics*, 127(4), 543–548.
12. Padurean, A., & Cheveresan, C. T. (2010). Transdisciplinarity in education. *Journal Plus Education/Educația Plus*, 6(1).
13. Sadigh, G., Khan, R., Kassin, M. T., & Applegate, K. E. (2014). Radiation safety knowledge and perceptions among residents: a potential improvement opportunity for graduate medical education in the United States. *Academic radiology*, 21(7), 869–878.
14. Slechta, A. M., & Reagan, J. T. (2008). An examination of factors related to radiation protection practices. *Radiologic technology*, 79(4), 297–305.
15. Tsubokura, M., Kitamura, Y., & Yoshida, M. (2018). Post-Fukushima radiation education for Japanese high school students in affected areas and its positive effects on their radiation literacy. *Journal of radiation research*, 59, 65–74.
16. Wojcik, A., Hamza, K., Lundegård, I., Enghag, M., Haglund, K., Arvanitis, L., & Schenk, L. (2019). Educating about radiation risks in high schools: towards improved public understanding of the complexity of low-dose radiation health effects. *Radiation and Environmental Biophysics*, 58, 13–20.

UDC 539.18 – 047.58

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-10>

Petro TROKHIMCHUCK

PhD in Physics and Mathematics, 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). Problemy modeliuвання krytychnykh termoiadernykh protsesiv [Problems of modeling a critical thermonuclear processes]. *Physics and Educational Technology*, 2, 71–78, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-10>

PROBLEMS OF MODELING A CRITICAL THERMONUCLEAR PROCESSES

A brief analysis of the problem of modeling critical thermonuclear processes is presented. Attention was focused on two types of processes. First is determined by the generation of thermonuclear reactions in stationary regime. This problem is main for the creation thermonuclear reaction and has Earth value. Second is lifetime of stationary phase. This problem is main for lifetime of stars and have Universe value. The first refers to the problem of the threshold for the occurrence of thermonuclear reactions. Here, Lawson's criterion is analyzed and its significance in the problem of thermonuclear reactor construction is shown. Deuterium-deuterium and deuterium-tritium reactions are analysed. Various mechanisms of modeling the generation and realization of these reactions, including magnetic fields, are discussed. The well-founded concepts of muon catalysis and its role in the generation of thermonuclear reactions are also given. The issue of the influence of the shape and symmetry of deuterium and tritium nuclei on the threshold for the generation of thermonuclear reactions and its contribution to the Lawson criterion is analyzed. The second part refers to astrophysics. The Schönberg-Chandrasekhar criterion is formulated. The Schönberg-Chandrasekhar theory of the residence time on the main sequence of the Hertzsprung-Ressel diagram, which is general for all stars of the main sequence of the diagram, is analyzed. The Schönberg-Chandrasekhar limit and its dependence on the nature of stars are analyzed: isothermal, polytropic, etc. The problems of homogeneity and heterogeneity of stars and its influence on the Schönberg-Chandrasekhar limit are observed too. Its role in the development of modern astrophysics is shown. Prospects for the use of the Schoenberg-Chandrasekhar limit for nuclei other than hydrogen and helium are also discussed.

Key words: thermonuclear processes, Lawson's criterion, Schoenberg-Chandrasekhar limit, deuterium, tritium, modeling.

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). Проблеми моделювання критичних термоядерних процесів. *Фізика та освітні технології*, 2, 71–78, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-10>

ПРОБЛЕМИ МОДЕЛЮВАННЯ КРИТИЧНИХ ТЕРМОЯДЕРНИХ ПРОЦЕСІВ

Подано короткий аналіз проблеми моделювання критичних термоядерних процесів. Акцентується увага на двох типах процесів. Перший визначається умовами виникнення та генерації термоядерних реакцій в стаціонарному режимі. Ця проблема є основною для створення термоядерних реакторів і має земне значення. Другий пов'язаний з часом життя стаціонарної фази термоядерного котла. Ця проблема є основною для життя зірок і має вселенське значення. Перша відноситься до проблеми порогу виникнення та генерації термоядерних реакцій і пов'язана з побудовою термоядерних реакторів. Проаналізовано критерій Лоусона та показано його значення в проблемі створення термоядерних реакторів. Виділено та проаналізовано дейтерій-дейтерієву та дейтерій-тритієву реакції. Обговорюються різні механізми моделювання генерації та реалізації цих реакцій, у тому числі за допомогою магнітних полів. Дано основні поняття мюонного каталізу та його роль у виникненні

термоядерних реакцій. Проаналізовано питання про вплив форми та симетрії ядер дейтерію та тритію на поріг генерації термоядерних реакцій і внесок у критерій Лоусона. Друга частина відноситься до астрофізики. Сформульовано критерій Шенберга-Чандрасекара. Проаналізовано теорію Шенберга-Чандрасекара про час перебування зірки на головній послідовності діаграми Герцшпрунга-Ресселя, яка є загальною для всіх зірок головної послідовності діаграми. Проаналізовано межу Шенберга-Чандрасекара та її залежність від природи зірок. Показано розширення теорії Шенберга-Чандрасекара на політропні процеси та неоднорідні системи. Розглянуто проблеми однорідності та неоднорідності зірок та її вплив на межу Шенберга-Чандрасекара. Показано його роль у розвитку сучасної астрофізики. Також обговорюються перспективи використання межі Шенберга-Чандрасекара для ядер, відрізняються від водню та гелію.

Ключові слова: термоядерні процеси, критерій Лоусона, межа Шенберга-Чандрасекара, дейтерій, тритій, моделювання.

Introduction. A brief analysis of the problem of modeling critical thermonuclear processes is presented. Attention was focused on two types of processes.

First is determined by the generation of generation of thermonuclear reactions in stationary regime (Abu-Shavareb, 2022; Beringer, 2012; Frank, 1947; Kelly, 2021; Lawson, 1957; Muon, 2024; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Trokhimchuck, 2024; Wesson, 2004). This problem is main for the creation thermonuclear reaction and has Earth value. Second is lifetime of stationary phase (Andrievsky, 2007; Chandrasekhar, 1938; Choudhuri, 2023; Schönberg, 1942; Trokhimchuck, 2024). This problem is main for lifetime of stars and have Universe value.

The first refers to the problem of the threshold for the occurrence of thermonuclear reactions. Here, Lawson's criterion is analyzed and its significance in the problem of thermonuclear reactor construction is shown. Deuterium-deuterium and deuterium-tritium reactions are analyzed. Various mechanisms of modeling the generation and realization of these reactions, including magnetic fields, are discussed. The well-founded concepts of muon catalysis and its role in the generation of thermonuclear reactions are also given. The issue of the influence of the shape and symmetry of deuterium and tritium nuclei on the threshold for the generation of thermonuclear reactions and its contribution to the Lawson criterion is analyzed (Abu-Shavareb, 2022; Lawson, 1942; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Trokhimchuck, 2024).

The second part refers to astrophysics. The Schönberg-Chandrasekhar criterion is formulated (Petkov, 2012). The Schönberg-Chandrasekhar theory of the residence time on the main sequence of the Hertzsprung-Ressel diagram, which is general for all stars of the main sequence of the diagram, is analyzed (Schönberg, 1942; Tipton, 2015). The Schönberg-Chandrasekhar limit and

its dependence on the nature of stars are analyzed: isothermal, polytropic, etc. (Trokhimchuck, 2024; Trokhimchuck, 2024; Wesson, 2004). The problems of homogeneity and heterogeneity of stars and its influence on the The Schönberg-Chandrasekhar limit are observed too (Trokhimchuck, 2024; Trokhimchuck, 2024; Wesson, 2004). Its role in the development of modern astrophysics is shown. Prospects for the use of the Schoenberg-Chandrasekhar limit for nuclei other than hydrogen and helium are also discussed.

Lawson's criterion and thermonuclear reactions

Calculations of the power balance in thermonuclear reactors operating under various idealized conditions are given by Lawson (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024). Two classes of reactors are considered: first, self-sustaining systems in which the charged reaction products are trapped and, secondly, pulsed systems in which the charged reaction products escape so that energy must be supplied continuously during the pulse. It is found that not only must the temperature be sufficiently high, but also the reaction must be sustained long enough for a definite fraction of the fuel to be burnt.

Main thermonuclear reaction are reactions between hydrogen isotopes: deuterium – deuterium, tritium – deuterium. This reactions have little crossectins $\sim 10^{-2}$ barns (Abu-Shavareb, 2022; Lawson, 1942; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Trokhimchuck, 2024; Wesson, 2004).

The energy relased per unit time and volume by thermonuclear reactions in a hot gas is given by (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024-2)

$$P_{\text{reac}} = n_1 n_2 v \sigma(T) E. \quad (1)$$

where n_1 and n_2 are the number densities of the nuclej of thr first and second kinds, and $\langle v \sigma(T) \rangle$ is the product of the relative velocities of the nuclei and the reaction cross-section averaged over the Maxvellian velocity distribution corresponding to

the temperature T , and E is the energy released by one reaction.

For D–D reaction this formula may be represented as (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024-2)

$$P_{\text{reac}} = \frac{1}{2} n^2 \langle v \sigma(T) \rangle E. \quad (2)$$

Energy can be lost from the hot gas in two ways, by radiation and by conduction. The power radiated per unite voloume in hydrogen is given as (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024-2)

$$P_B = 1.4 \cdot 10^{-34} n^2 T^{1/2} \text{ watts } \cdot \text{cm}^{-3}. \quad (3)$$

Let us give an example of systems in which reaction products are retained. The orders of magnitude involved, the slowing down range of bthe charged reaction products in a gas at 10^8 degrees and 10^4 atmospheres pressure ($n = 3 \cdot 10^{17} \text{ nuclei/cm}^3$) is on the order of kilometre. The range of neutrons is hundreds of kilometres (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024).

For systems in which the reaction products escape the parameter R was introduced; this is ratio of the energy realized in the hot gas to the energy supplied. Now the energy realized by the reraction appears as heat generated in the walls of apparatus, and thus has to be converted to electrical, mechanical or chemical energy before it can be fed back into the gas. If η is the efficiency with which is can be done, then condition for a system with a net power gain is

$$\eta(R + 1) > 1. \quad (4)$$

The maximum value of η is about $1/3$, so what R must be greater than 2 (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024).

For the our pulsed cycle we have

$$R = \frac{tP_{\text{reac}}}{tP_B + 3nkT} = \frac{P_{\text{reac}}/3n^2kT}{P_B/3n^2kT + 1/nt}, \quad (5)$$

where P_{reac} and P_B are respectively the reacyion power and radiated p ower per unite volume. The $3nkT$ term represents the energy required to heat the gas to a temperature T . Electron binding energies are neglected, but the contribution from electrons is included (this accounts for the factor 3 rather than $3/2$) (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024).

Since P_{reac} and P_B are are both proportional to n^2 , R is a function of the T and nt . In Fig. 1 curves R against T for various values of T are shown for D – Dreaction assuming that the tritium formed is also burnt.

Fig. 2 shows similar curvers for T-D reaction (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024).

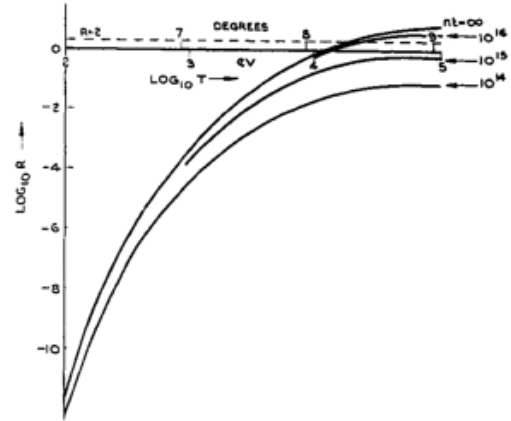


Fig. 1. Variation of R with T for various values of nt for D – D reaction (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024)

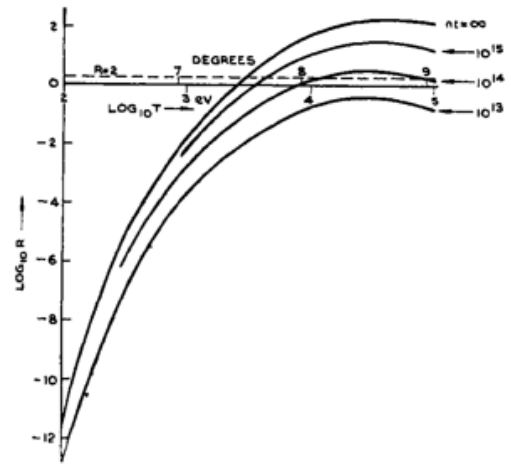
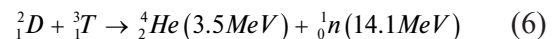
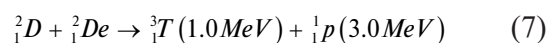


Fig. 2. Variation of R with T for various values of nt for T – D reaction (Lawson, 1942; Trokhimchuck, 2024-2)

By equating radiation losses and the volumetric fusion rates, Lawson estimated the minimum temperature for the fusion for the deuterium–tritium (D-T) reaction (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004)



to be 30 million degrees (2.6 keV), and for the deuterium–deuterium (D-D) reaction



to be 150 million degrees (12.9 keV).

The confinement time τ_E measures the rate at which a system loses energy to its environment. The faster the rate of loss of energy, P_{loss} , the shorter the

energy confinement time. It is the energy density W (energy content per unit volume) divided by the power loss density P_{loss} (rate of energy loss per unit volume)

$$\tau_E = \frac{W}{P_{loss}}. \quad (8)$$

For a fusion reactor to operate in steady state, the fusion plasma must be maintained at a constant temperature. Thermal energy must therefore be added at the same rate the plasma loses energy in order to maintain the fusion conditions. This energy can be supplied by the fusion reactions themselves, depending on the reaction type, or by supplying additional heating through a variety of methods.

For illustration, the Lawson criterion for the D-T reaction will be derived here, but the same principle can be applied to other fusion fuels. It will also be assumed that all species have the same temperature, that there are no ions present other than fuel ions (no impurities and no helium ash), and that D and T are present in the optimal 50-50 mixture.^a Ion density then equals electron density and the energy density of both electrons and ions together is given by (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004)

$$W = 3nT, \quad (9)$$

where T is the temperature in electronvolt (eV) and n is the particle density.

The volume rate f (reactions per volume per time) of fusion reactions is

$$f = n_D n_T \langle \sigma v \rangle \geq \frac{1}{4} n^2 \langle \sigma v \rangle, \quad (10)$$

where σ is the fusion cross section, v is the relative velocity, and $\langle \rangle$ denotes an average over the Maxwellian velocity distribution at the temperature T .

The volume rate of heating by fusion is f times E_{ch} , the energy of the charged fusion products (the neutrons cannot help to heat the plasma). In the case of the D-T reaction, $E_{ch} = 3.5 \text{ MeV}$.

The Lawson criterion requires that fusion heating exceeds the losses (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004):

$$fE_{ch} \geq P_{loss}. \quad (11)$$

Substituting in known quantities yields:

$$\frac{1}{4} n^2 \langle \sigma v \rangle E_{ch} \geq \frac{2nT}{\tau_E}. \quad (12)$$

Rearranging the equation produces [3-6]:

$$n\tau_E \geq L = \frac{12T}{E_{ch} \langle \sigma v \rangle}. \quad (13)$$

The quantity $\frac{T}{\langle \sigma v \rangle}$ is a function of temperature with an absolute minimum. Replacing the function with its minimum value provides an absolute lower limit for the product $n\tau_E$. This is the Lawson criterion (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004).

For the deuterium–tritium reaction, the physical value is at least

$$n\tau_E \geq 1.5 \cdot 10^{20} \frac{s}{cm^3}. \quad (14)$$

The minimum of the product occurs near $T = 26 \text{ keV}$.

The Lawson criterion, or minimum value of (electron density energy confinement time) required for self-heating, for three fusion reactions is bepresented in Fig. 3 (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004)

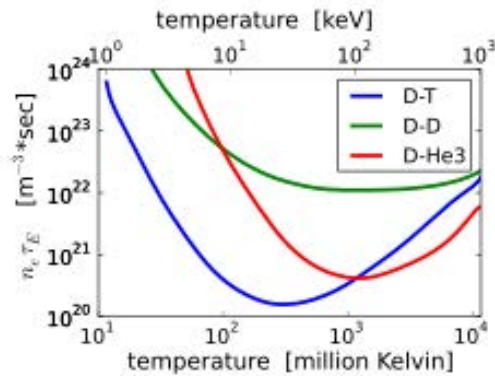


Fig. 3. The Lawson criterion, or minimum value of (electron density energy confinement time) required for self-heating, for three fusion reactions. For DT, $n\tau_E$ minimizes near the temperature 25 keV (300 million kelvins) (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004)

A still more useful figure of merit is the "triple product" of density, temperature, and confinement time, $nT\tau_E$. For most confinement concepts, whether inertial, mirror, or toroidal confinement, the density and temperature can be varied over a fairly wide range, but the maximum attainable pressure p is a constant. When such is the case, the fusion power density is proportional to $p^2 \langle \sigma v \rangle / T^2$. The maximum fusion power available from a given machine is therefore reached at the temperature T where $\langle \sigma v \rangle / T^2$ is a maximum. By continuation of the above derivation, the following inequality is readily obtained (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004):

$$nT\tau_E \geq \frac{12}{E_{ch}} \frac{T}{\langle \sigma v \rangle}. \quad (15)$$

This quantity is also a function of temperature with an absolute minimum at a slightly lower temperature than

For the D-T reaction, the minimum occurs at $T = 14 \text{ keV}$. The average $\langle \sigma v \rangle$ in this temperature region can be approximated as (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Wesson, 2004)

$$\langle \sigma v \rangle = 1.1 \cdot 10^{-24} T^2 \frac{m^2}{s}, \quad T \text{ in keV}. \quad (16)$$

So the minimum value of the triple product value at $T = 14 \text{ keV}$ is about

$$nT\tau_E \geq 3 \cdot 10^{21} \text{ keV} \cdot s / m^3 (3.5 \cdot 10^{28} K \cdot s / m^3). \quad (17)$$

This number has not yet been achieved in any reactor, although the latest generations of machines have come close. JT-60 reported $1.53 \times 10^{21} \text{ keV} \cdot s \cdot m^{-3}$. For instance, the TFTR has achieved the densities and energy lifetimes needed to achieve Lawson at the temperatures it can create, but it cannot create those temperatures at the same time. ITER aims to do both (Wesson, 2004).

The fusion triple product condition for three fusion reactions are represented in Fig. 4 (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015)

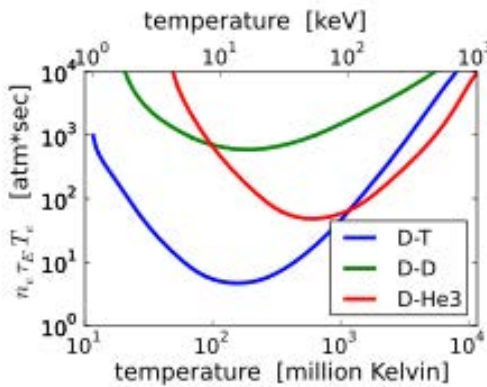


Fig. 4. The fusion triple product condition for three fusion reactions (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015)

As for tokamaks, there is a special motivation for using the triple product. Empirically, the energy confinement time τ_E is found to be nearly proportional to $n^{1/3}/P^{2/3}$. In an ignited plasma near the optimum temperature, the heating power P equals fusion power and therefore is proportional to $n^2 T^2$. The triple product scales as

$$nT\tau_E \approx \begin{cases} nT \left(\frac{n^{1/3}}{P^{2/3}} \right); \\ nT \left(\frac{n^{1/3}}{(n^2 P^2)^{2/3}} \right); \\ T^{-1/3}. \end{cases} \quad (18)$$

The triple product is only weakly dependent on temperature as $T^{-1/3}$. This makes the triple product an adequate measure of the efficiency of the confinement scheme (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015). The Lawson criterion applies to inertial confinement fusion (ICF) (Tipton, 2015) as well as to magnetic confinement fusion (MCF) (Petkov, 2012) but in the inertial case it is more usefully expressed in a different form. A good approximation for the inertial confinement time is the time that it takes an ion to travel over a distance R at its thermal speed

$$v_{th} = \sqrt{\frac{k_B T}{m_i}}, \quad (19)$$

where m_i denotes mean ionic mass. The inertial confinement time can thus be approximated as

$$\tau_E \approx \frac{R}{v_{th}} = R \sqrt{\frac{m_i}{k_B T}}. \quad (20)$$

By substitution of the above expression into relationship (20), we obtain

$$n\tau_E \approx nR \sqrt{\frac{m_i}{k_B T}} \geq \frac{12}{E_{ch}} \cdot \frac{k_B T}{\langle \sigma v \rangle}. \quad (21)$$

From where we get the following formula

$$nR \geq \frac{12}{E_{ch}} \cdot \frac{(k_B T)^{3/2}}{\langle \sigma v \rangle m_i^{1/2}} \quad (22)$$

or

$$nR \geq \frac{(k_B T)^{3/2}}{\langle \sigma v \rangle}. \quad (23)$$

This product must be greater than a value related to the minimum of $T^{3/2}/\langle \sigma v \rangle$. The same requirement is traditionally expressed in terms of mass density $\rho = \langle nm_i \rangle$:

$$\rho \cdot R \geq 1 \frac{g}{cm^2}. \quad (24)$$

Satisfaction of this criterion at the density of solid D-T (0.2 g/cm^3) would require a laser pulse of implausibly large energy. Assuming the energy required scales with the mass of the fusion plasma ($E_{laser} \sim \rho R^3 \sim \rho^{-2}$), compressing the fuel to 10^3 or 10^4 times solid density would reduce the energy required by a factor of 10^6 or 10^8 , bringing it into

a realistic range. With a compression by 10^3 , the compressed density will be 200 g/cm^3 , and the compressed radius can be as small as 0.05 mm . The radius of the fuel before compression would be 0.5 mm . The initial pellet will be perhaps twice as large since most of the mass will be ablated during the compression (Petkov, 2012; Tipton, 2015).

The fusion power times density is a good figure of merit to determine the optimum temperature for magnetic confinement, but for inertial confinement the fractional burn-up of the fuel is probably more useful. The burn-up should be proportional to the specific reaction rate ($n^2 \langle \sigma v \rangle$) times the confinement time (which scales as $T^{-1/2}$) divided by the particle density n (Abu-Shavareb, 2022; Petkov, 2012; Tipton, 2015):

$$\text{burn-up fraction} \approx \begin{cases} n^2 \langle \sigma v \rangle T^{1/2} / n; \\ n T \langle \sigma v \rangle / T^{3/2}. \end{cases} \quad (25)$$

Thus the optimum temperature for inertial confinement fusion maximises $\langle \sigma v \rangle / T^{3/2}$, which is slightly higher than the optimum temperature for magnetic confinement.

Lawson's analysis is based on the rate of fusion and loss of energy in a thermalized plasma. There is a class of fusion machines that do not use thermalized plasmas but instead directly accelerate individual ions to the required energies. The best-known examples are the migma, fusor and polywell (Abu-Shavareb, 2022; Lawson, 1942; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Trokhimchuck, 2024; Wesson, 2004).

When applied to the fusor, Lawson's analysis is used as an argument that conduction and radiation losses are the key impediments to reaching net power. Fusors use a voltage drop to accelerate and collide ions, resulting in fusion. The voltage drop is generated by wire cages, and these cages conduct away particles (Abu-Shavareb, 2022; Lawson, 1942; Petkov, 2012; Tipton, 2015; Trokhimchuck, 2024; Wesson, 2004).

Polywells are improvements on this design, designed to reduce conduction losses by removing the wire cages which cause them. Regardless, it is argued that radiation is still a major impediment.

Muon-catalyzed fusion (abbreviated as μCF or MCF) is a process allowing nuclear fusion to take place at temperatures significantly lower than the temperatures required for thermonuclear fusion, even at room temperature or lower (Beringer, 2012; Frank, 1947; Kelly, 2021; Muom, 2024). It is one of the few known ways of catalyzing nuclear fusion reactions.

Muons are unstable subatomic particles which are similar to electrons but 207 times more massive. If a muon replaces one of the electrons in

a hydrogen molecule, the nuclei are consequently drawn 186 times closer than in a normal molecule, due to the reduced mass being 186 times the mass of an electron. When the nuclei move closer together, the fusion probability increases, to the point where a significant number of fusion events can happen at room temperature (Beringer, 2012; Frank, 1947; Kelly, 2021; Muom, 2024).

Methods for obtaining muons, however, require far more energy than can be produced by the resulting fusion reactions. Muons have a mean lifetime of $2.2 \mu\text{s}$ (Beringer, 2012), much longer than many other subatomic particles but nevertheless far too brief to allow their useful storage.

To create useful room-temperature muon-catalyzed fusion, reactors would need a cheap, efficient muon source and/or a way for each individual muon to catalyze many more fusion reactions (Beringer, 2012; Frank, 1947; Kelly, 2021; Petkov, 2012).

From our point of view, the following additional studies should be conducted for optimal modeling of efficient thermonuclear reactors: 1. Choose the conditions of the experiment so that the majority of mesonuclei participate in synthesis reactions. 2. To take into account the geometric intersection of synthesis reactions and to select appropriate nuclei and the geometry of the experiment for this purpose. 3. More widely apply impulse processes for initial detonation and obtaining starting conditions for obtaining the required reaction characteristics.

The Schönberg-Chandrasekhar limit and astrophysics. In stellar astrophysics, the Schönberg–Chandrasekhar limit (Chandrasekhar, 1938; Schönberg, 1942; Trokhimchuck, 2024-1) is the maximum mass of a non-fusing, isothermal core that can support an enclosing envelope. It is expressed as the ratio of the core mass to the total mass of the core and envelope. Estimates of the limit depend on the models used and the assumed chemical compositions of the core and envelope; typical values given are from 0.10 to 0.15 (10% to 15% of the total stellar mass). This is the maximum to which a helium-filled core can grow, and if this limit is exceeded, as can only happen in massive stars, the core collapses, releasing energy that causes the outer layers of the star to expand to become a red giant. It is named after the astrophysicists Subrahmanyan Chandrasekhar and Mario Schönberg, who estimated its value in a 1942 paper (Schönberg, 1942). They estimated it to be

$$\left(\frac{M_c}{M} \right) = 0.37 \left(\frac{\mu_c^2}{\mu_e^2} \right), \quad (26)$$

where M is the mass, μ is the mean molecular weight, index c denotes the core, and index e is the envelope.

The Schönberg-Chandrasekhar limit comes into play when fusion in a main-sequence star exhausts the hydrogen at the center of the star. The star then contracts until hydrogen fuses in a shell surrounding a helium-rich core, both of which are surrounded by an envelope consisting primarily of hydrogen. The core increases in mass as the shell burns its way outwards through the star. If the star's mass is less than approximately 1.5 solar masses, the core will become degenerate before the Schönberg-Chandrasekhar limit is reached, and, on the other hand, if the mass is greater than approximately 6 solar masses, the star leaves the main sequence with a core mass already greater than the Schönberg-Chandrasekhar limit so its core is never isothermal before helium fusion. In the remaining case, where the mass is between 1.5 and 6 solar masses, the core will grow until the limit is reached, at which point it will contract rapidly until helium starts to fuse in the core.

In astrophysics, as a rule, stationary processes take place. This is especially true for stars that are on the main sequence of the Hertzsprung-Russell diagram (Andrievsky, 2007; Chandrasekhar, 1938; Schönberg, 1942; Trokhimchuk, 2024-1). The life time of the stars on this diagram, depending on their spectral class, lasts from several million years to 100 million years. The stay of the star on the main sequence lasts until its nuclear fuel – hydrogen – is exhausted in its superstructure. More precisely, until, as established by M. Schönberg and S. Chandrasekhar, a helium nucleus with a mass of 10-20 percent of the mass of the Sun is formed in the center of the star.

The time it takes for a star to reach the Schönberg-Chandrasekhar evolutionary limit (that is, the time it spends on the leading sequence of the Hertzsprung-Russell diagram) is estimated by the formula (Chandrasekhar, 1938; Trokhimchuk, 2024):

$$t_{LS} \sim \frac{M}{L} \cong 10^{10} \left(\frac{M_G}{M} \right)^{-2.5} \text{ years.}$$

where M is the mass of the star in the masses of the Sun M_G , L – the luminosity of the star in the luminosities of the Sun. Here it is taken into account that the luminosity of the star is $L \sim M^{-3.5}$ (Chandrasekhar, 1938; Trokhimchuk, 2024-1)

and that the reserves of thermonuclear energy are proportional to the total mass of the star. The final stage of this evolution is the formation of a red giant or supergiant (Chandrasekhar, 1938; Trokhimchuk, 2024-1).

The existence of a maximum isothermal core mass fraction (q_{max}), the Schönberg-Chandrasekhar limit, is one of the 'classic' results from the theory of stellar structure. This limit can be demonstrated through a simplified composite polytrope model in which an isothermal core is surrounded by an $n = 1$ polytrope envelope. While this model underestimates q_{max} by 25 % in the homogeneous case, it is accurate to within 5 % in the more realistic inhomogeneous situation (Beech, 1988).

The Schönberg-Chandrasekhar limit in post-main-sequence evolution for stars of masses in the range $1.4 \leq M / M_G \leq 6.0$ gives the maximum pressure that the stellar core can withstand, once of the central hydrogen is exhausted (Choudhuri, 2023). It is usually expressed as a quadratic function of $1/\alpha$, with α being the ratio of the mean molecular weight of the core to that of the envelope. Here, we revisit this limit in scenarios where the pressure balance equation in the stellar interior may be modified, and in the presence of small stellar pressure anisotropy, the might arise due to several physical phenomena. Using numerical analysis, we derive a three parameter-dependent master formula for the limit, and discuss various physical consequences. As a by-product, in a limiting case of our formula, we find that in the standard Newtonian framework, the Schönberg-Chandrasekhar limit is best-fit by a polynomial that is linear. Rather than quadratic, to lowest order in $1/\alpha$ (Choudhuri, 2023).

From our point of view, the Schönberg-Chandrasekhar theory should be extended to heavier chemical elements and to more short-lived and long-lived processes.

Conclusions. The problem of generation the stationary thermonuclear reactions is discussed.

Lawson's criterion and its application for the estimation the critical regimes of thermonuclear reactions are analyzed.

Ways of develop the more widely applications of Lawson's criterion are discussed.

Main peculiarities of Schönberg-Chandrasekhar limit in astrophysics and expansion area of its applications are observed.

REFERENCES:

1. Abu-Shawareb, H. et al. (3.5 pages) (2022). Lawson Criterion for Ignition Exceeded in an Inertial Fusion Experiment. *Physical Review Letters*, 129, 075001, 17 p.

2. Beringer, J. et al. (0.5 page) (2012). Review of Particle Physics. *Phys. Rev. D* 86, 010001, 1526 p.
3. Frank, F.C. (1947). Hypothetical Alternative Energy Sources for the 'Second Meson' Events. *Nature*, vol. 160(4068), pp. 525–527.
4. Kelly, R. S., Hart, L. J. F., & Rose, S. J. (2021). An investigation of efficient muon production for use in muon catalyzed fusion". *Journal of Physics: Energy*, vol. 3 (3), pp. 525–527.
5. Lawson, J. D. (1957). Some Criteria for the Power Producing Thermonuclear Reactor. *Proc. Of the Physical Society*, Sec. B, 70(1), pp. 6-10.
6. Muon-catalyzed fusion (2024). URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Muon-catalyzed_fusion
7. Petkow, D., Gabrielli, R.A., Herdrich, G., R. Laufer, R., & Röse, H.-P. (2012). Generalized Lawson criterion for magnetic fusion applications in space. *Fusion Engineering and Design*, Vol. 87, is.1, pp. 30–38.
8. Tipton, R. E. (2015). *Generalized Lawson Criteria for Inertial Confinement Fusion*. Laurence Livermore National Laboratory. Technical Report LLNL-TR-676592, 2015, 59 p.
9. Trokhimchuck, P. P. (2024). To Question about Main Principles and Criteria of Critical Processes and Phenomena, *IJARPS*, vol. 11, is. 6, pp. 1–17.
10. Wesson, J. (2004). *Tokamaks*. Oxford: Clarendon Press, 750 p.
11. Andrievsky, S. M., & Klymyshyn, I. A. (2007). *Kurs zagalnoyi astronomiyi* [General astronomy course]. Odessa: Astroprint, 476 p. [in Ukrainian].
12. Chandrasekhar, S. (1938). *Introduction to the Study of Stellar Structure*. Chicago: University Press, 508 p.
13. Choudhuri, S., & Tapobrata, S. (2023). The Schönberg-Chandrasekhar limit In presence of small anisotropy and modified gravity. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 523, 2023, pp. 518–526.
14. Schönberg, M., & Chandrasekhar, S. (1942). On the evolution of main-sequence star. *The Astrophysical Journal*, Vol. 96, Is.2, pp.161–172.
15. Trokhimchuck, P. P. (2024). Some Problems of Modeling Astrophysical and Cosmological Critical Processes. In: Eds. Jayminkumar Rajanikant Ray @ Shyam Sunder Sharma. *Recent Review and Research in Physics*, Vol. 10, Ch. 5. New Dehli: AkiNik Publications, pp. 65-94.
16. Beech, M. (1988). The Schönberg-Chandrasekhar limit: Polytropic Approximation. *Astrophysics and Space Science*, vol. 147, pp. 219–227.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Abu-Shawareb H. et al. (3.5 pages) Lawson Criterion for Ignition Exceeded in an Inertial Fusion Experiment. *Physical Review Letters*. 2022. 129. 075001. 17p.
2. Beringer J. et al. (0.5 page). Review of Particle Physics. *Phys. Rev.* 2012. D 86, 010001, 1526 p.
3. Frank F.C. Hypothetical Alternative Energy Sources for the 'Second Meson' Events. *Nature*. 1947. vol. 160(4068). pp. 525–527.
4. Kelly R. S., Hart L. J. F., Rose S. J. An investigation of efficient muon production for use in muon catalyzed fusion". *Journal of Physics: Energy*, 2021.vol. 3 (3), pp. 525–527.
5. Lawson J. D. Some Criteria for the Power Producing Thermonuclear Reactor. *Proc. Of the Physical Society*, Sec. B, 1957, 70(1), pp. 6–10.
6. Muon-catalyzed fusion. 2024. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Muon-catalyzed_fusion
7. Petkow D., Gabrielli R.A., Herdrich G., R. Laufer R., Röse H.-P. Generalized Lawson criterion for magnetic fusion applications in space. *Fusion Engineering and Design*, 2012, Vol. 87, is.1, pp.30-38.
8. Tipton R. E. *Generalized Lawson Criteria for Inertial Confinement Fusion*. Laurence Livermore National Laboratory. Technical Report LLNL-TR-676592, 2015, 59 p.
9. Trokhimchuck P. P. To Question about Main Principles and Criteria of Critical Processes and Phenomena, *IJARPS*, 2024, vol. 11, is. 6, pp. 1-17.
10. Wesson J. *Tokamaks*. Oxford: Clarendon Press, 2004, 750 p.
11. Андрієвський С. М., Климишин І. А. Курс загальної астрономії. Одеса: Астропринт, 476 с.
12. Chandrasekhar S. *Introduction to the Study of Stellar Structure*. Chicago: University Press, 1938, 508 p.
13. Choudhuri S., Tapobrata S. The Schönberg-Chandrasekhar limit In presence of small anisotropy and modified gravity. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 523, 2023, pp. 518–526.
14. Schönberg M., Chandrasekhar S. On the evolution of main-sequence star. *The Astrophysical Journal*, 1942, Vol. 96, Is.2, pp. 161–172.
15. Trokhimchuck P. P. Some Problems of Modeling Astrophysical and Cosmological Critical Processes. In: Eds. Jayminkumar Rajanikant Ray @ Shyam Sunder Sharma. *Recent Review and Research in Physics*, 2024, Vol. 10, Ch. 5. New Dehli: AkiNik Publications, pp. 65–94.
16. Beech M. The Schönberg-Chandrasekhar limit: Polytropic Approximation. *Astrophysics and Space Science*, 1988, vol. 147, pp. 219–227.

УДК 621.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-11>

Ростислав ЯВОРСЬКИЙ

доктор філософії зі спеціальності «Фізика та астрономія», доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-5690-7486>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57193824044

Андрій КАШУБА

доктор фізико-математичних наук, доцент кафедри загальної фізики, 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

Лілія ЯВОРСЬКА

аспірантка кафедри фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3593-9934>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57221619996

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

Бібліографічний опис статті: Яворський, Р., Кашуба, А., Яворська, Л., Замуруєва, О. (2024). Моделювання впливу нановолокон CdS на властивості фотоелектричного перетворювача II покоління. *Фізика та освітні технології*, 2, 79–89, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-11>

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ НАНОВОЛОКОН CdS НА ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЕЛЕКТРИЧНОГО ПЕРЕТВОРЮВАЧА II ПОКОЛІННЯ

Робота присвячена дослідженню впливу нановолокон CdS на характеристики тонкоплівкових фотоелектричних перетворювачів другого покоління з гетероструктурою ITO/SnO₂/nw-CdS/CdTe. Проведено моделювання за допомогою програмного забезпечення SCAPS, що дозволило визначити оптимальні параметри структури для досягнення максимальної ефективності. Розглянуто використання шару нановолокон CdS як буферного (віконного) шару, що забезпечує покращені оптичні властивості та підвищує коефіцієнт заповнення й ефективність перетворення.

Моделювання показало, що оптимальна товщина поглинаючого шару CdTe складає 3 мкм, буферного шару CdS – 120 нм, а верхнього провідного шару SnO₂ – 40 нм. Для цих параметрів ефективність фотоелектричного перетворювача досягає 13,33%, а фактор заповнення становить 77,39%. Застосування нановолокон CdS сприяє зменшенню рекомбінації носіїв заряду на межі розділу шарів, зменшенню втрат світла через відбиття, а також поліпшенню транспортування носіїв заряду. Внаслідок цього вдалося покращити спектральну реакцію квантової ефективності та знизити вплив дефектів на продуктивність пристрою.

Досліджено вплив густини дефектних станів на інтерфейсі nw-CdS/CdTe. Результати показують, що збільшення густини дефектів понад 10¹² см⁻² призводить до значного зниження напруги холостого ходу, струму короткого замикання та, відповідно, ефективності. Було встановлено, що дефектні стани мають значний вплив на параметри пристрою, тому їх контроль є важливим для підвищення продуктивності.

Отримані результати демонструють переваги впровадження нановолокон CdS у тонкоплівкові сонячні елементи на основі гетеропереходу CdS/CdTe. Такий підхід дозволяє досягти високої ефективності та стабільності роботи сонячних елементів, що робить їх перспективними для масштабного виробництва.

Ключові слова: сонячний елемент, фотоелектричні параметри, густина міжфазних станів, нановолокна.

Rostyslav YAVORSKYI

Doctor of Philosophy in the specialty “Physics and Astronomy”, Associate Professor at the Department of Physics and Chemistry of Solids, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57 Shevchenko str., Ivano-Frankivsk, Ukraine, 76018

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-5690-7486>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57193824044

Andrii KASHUBA

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of General Physics, Lviv Polytechnic National University, 12 S. Bandery str., Lviv, Ukraine, 79000

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3650-3892>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

Lilia YAVORSKA

PhD Student, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57 Shevchenko str., Ivano-Frankivsk, Ukraine, 76018

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3593-9934>

SCOPUS-AUTHOR ID: 57221619996

Oksana ZAMURUEVA

PhD in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at 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

To cite this article: Yavorskyi, R., Kashuba, A., Yavorska, L., Zamurueva, O. (2024). Modeliuvannia vplyvu nanovolokon CdS na vlastyvoli fotoelektrychnoho peretvoriuvacha II pokolinnia [Modeling the Influence of CdS Nanowires on the Properties of a Second-Generation Photovoltaic Converter]. *Physics and Educational Technology*, 2, 79–89, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-11>

MODELING THE INFLUENCE OF CdS NANOWIRES ON THE PROPERTIES OF A SECOND-GENERATION PHOTOVOLTAIC CONVERTER

The article investigates the influence of CdS nanowires on the characteristics of second-generation thin-film photovoltaic converters based on the ITO/SnO₂/nw-CdS/CdTe heterostructure. Modeling was performed using the SCAPS software, enabling the identification of optimal structural parameters to achieve maximum efficiency. The study highlights the use of a CdS nanowire layer as a buffer (window) layer, which provides enhanced optical properties and improves the fill factor and energy conversion efficiency.

The modeling revealed that the optimal thickness of the CdTe absorber layer is 3 μm, the CdS buffer layer is 120 nm, and the SnO₂ conductive layer is 40 nm. For these parameters, the photovoltaic converter efficiency reaches 13.33%, with a fill factor of 77.39%. The application of CdS nanowires reduces carrier recombination at the layer interface, decreases light losses due to reflection, and enhances charge carrier transport. As a result, the spectral response of quantum efficiency improves, and the impact of defects on device performance diminishes.

The effect of interface defect density at the nw-CdS/CdTe boundary was also studied. Results show that increasing the defect density beyond 10¹² cm⁻² significantly reduces the open-circuit voltage, short-circuit current, and thus the overall efficiency. It was established that interface defect states critically affect device parameters, emphasizing the importance of their control to enhance performance.

The findings demonstrate the advantages of integrating CdS nanowires into thin-film solar cells based on the CdS/CdTe heterojunction. This approach allows for achieving high efficiency and operational stability of solar cells, making them promising for large-scale production.

Key words: solar cell, photovoltaic parameters, interface state density, nanowires.

Вступ. Тонкоплівкові фотоелементи вважаються одними з найперспективніших сонячних елементів завдяки високій ефективності перетворення енергії, низькій вартості та зручності для масштабного виробництва. Для широко-масштабного застосування сонячної енергії, яка б конкурувала зі звичайним викопним паливом, дуже важливо, щоб фотоелектрична система забезпечувала стабільну та високу потужність протягом тривалого часу в екстремальних умовах експлуатації.

Найоптимальніші тонкоплівкові сонячні елементи — це телурид кадмію (CdTe), селенід міді-індію (CIGS) і аморфний кремній (a-Si) з ефективністю 18,3%, 20% і 12,3% відповідно (Wisz, 2018). Повідомлялося, що технологія CdTe приблизно на 30% дешевша за технологію CIGS і приблизно на 40% дешевша за технологію a-Si (Taesoo, 2017). Отже, за допомогою тонкоплівкових сонячних елементів на основі CdTe можна досягти найвищого співвідношення «ефективність/вартість». Матеріали для тонкоплівкових сонячних елементів в даний час є предметом багатьох досліджень дослідження. First Solar Corporation (найбільша компанія по виготовленні сонячних елементів на основі CdTe) повідомляла, що середня ефективність зросла з 12,9% у 2012 році до 16,6% у 2016 році для їхніх модулів CdTe (First Solar, 2017). На сьогоднішній день найвище значення ККД становить становить 21,3%. Найкраще значення ефективності для модулів CIGS становить 20,5% (Green, 2024). Також існує значне промислове виробництво на основі структур CdTe/CdS, яке значною мірою представлене американською корпорацією First Solar, що використовуються на найбільшій на сьогодні сонячній електростанції Agua Caliente Solar Project в Арізоні (Hiscock, 2012). Слід зазначити, що тонкоплівкова технологія на основі CdTe є першою технологією, яка дозволила знизити витрати на виробництво сонячної енергії до 0,57 \$/Wp (Scarpulla, 2023).

Тонкоплівкові сонячні елементи на основі гетеропереходу CdS/CdTe у яких шар поглинача телуриду кадмію має пряму заборонену зону 1,45 еВ, а буферний шар CdS – 2,4 еВ. Різниця в ширині забороненої зони є оптимальною. Завдяки цьому вартість виробництва сонячного елемента на основі CdTe досить низька. Недавні дослідження показують, що сонячний

елемент CdS/CdTe продемонстрував майже ідеальну спектральну характеристику квантової ефективності та високу надійність (Bertoncello, 2020). Проте, більшість процесів виготовлення тонкоплівкових сонячних елементів CdS/CdTe мають свої недоліки. Основними недоліками є: коротке замикання шару прозорого провідного оксиду (TCO) і шару CdTe, коли шар CdS дуже тонкий, і густина захоплення всередині шару CdTe, яка відповідає за короткий час життя неосновних носіїв (Yavorskyi, 2020). Зокрема формування шару CdS товщиною менше 100 нм для зменшення його поглинання створює серйозні труднощі, оскільки це, як правило, призводить до утворення точкових дірок у CdS. Ці точкові дірки можуть призвести до прямого контакту напівпровідника р-типу (CdTe або CIGS) із прозорим електродом (наприклад, ІТО), таким чином утворюючи мікропереходи та мікروشунти та погіршуючи ефективність елемента.

У зв'язку з цим для підвищення ефективності розроблено конструктивну схему сонячного елемента на основі нановолокон pw-CdS/CdTe (Dang, 2016). Добре відомо, що вплив нановолокон на оптичні властивості віконного шару CdS є важливим аспектом у розробці тонкоплівкових сонячних елементів. Нановолокна можуть суттєво покращити оптичні характеристики матеріалу, що, у свою чергу, підвищує ефективність перетворення сонячної енергії. Нановолокна CdS мають більшу поверхневу площу в порівнянні з традиційними плівками, що дозволяє більш ефективно поглинати світло. Це може призвести до зростання поглинальних характеристик у видимій області спектра оптимальній для роботи фотоперетворювача на основі CdTe (Hongmei, 2014). Іншим вагомим аспектом застосувань 2D наноматеріалів це можливість створювати мікроструктури, які покращують розсіювання світла в шарі CdS, що дозволяє збільшити шлях, який проходить світло через матеріал, і, відповідно, підвищити ймовірність його поглинання. Завдяки своїй структурі, нановолокна зменшують втрати світла, які виникають через відбиття на поверхні. Загалом, інтеграція нановолокон у віконний шар CdS може значно поліпшити його оптичні властивості, що позитивно вплине на ефективність тонкоплівкових сонячних елементів (Dang, 2016; Shuai, 2020).

У цій роботі теоретично показано вплив різних фізичних параметрів шарів CdS, nw-CdS, CdTe, SnO₂ та ITO на фотоелектричні параметри змодельованих сонячних елементів. Це дослідження показує, що включення нановолокон у буферний шар CdS є перспективним для високоефективних сонячних елементів із подвійним гетеропереходом CdS/CdTe.

Методологія досліджень. Фотоелектричний перетворювач моделювався за допомогою програмного забезпечення SCAPS v.3.3.09 з урахуванням змінних параметрів, як описано в інших джерелах (Burgelman, 2004). Симуляційний пакет SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) створений для модельних розрахунків тонкоплівкових сонячних елементів на основі напівпровідникових сполук (Burgelman, 2008; Verschraegen, 2007). Здатність SCAPS моделювати численні характеристики сонячних елементів, такі як структура пристрою, властивості матеріалу, оптичні властивості та фотоелектричні процеси, є однією з його важливих переваг. Завдяки цим можливостям дослідники можуть використовувати SCAPS для вивчення того, як різні параметри впливають на ефективність сонячних елементів, і визначення ідеальних значень для підвищення продуктивності.

Програмне середовище використовує розв'язок рівняння Пуассона та рівняння неперервності та метод дрейфу-дифузії для вільних електронів і вільних дірок (Burgelman, 2004). Тому він може враховувати вплив зміщення забороненої зони, рухливості носіїв, концентрація легування та ширину забороненої зони. Для проведення моделювання заданої структури

сонячного елемента в середовищі SCAPS використовували світловий спектр AM 1,5 та потужність випромінювання 1000 Вт/м² при температурі 300 К. В якості переднього контактного шару використовувався шар ITO та Mo як задній контакт.

Програмне середовище SCAPS використовувалось для моделювання J-V характеристик сонячного елемента на основі нановолокон CdS-nw/CdTe. Схема фотоелектричної комірки представлена на рисунку 1. На схемі представлено фотоперетворювач у 2D- і 3D-форматі, поглинаючим шаром якого є CdTe. В якості буферного шару (віконного шару) використано шар із нановолокон CdS.

Головний екран, який з'являється після запуску середовища SCAPS, виглядає як показано на рисунку 2. На панелі робочих характеристик задається температура (T, K), напруга (U, V), частота (f, Hz) і кількість операцій. Послідовний опір, опір шунта, освітлення (темне/світле) вводяться на панелі запуску. Панель «Визначення сонячних елементів» з'являється після натискання кнопки «Поставити задачу» на панелі дій. За допомогою цієї панелі можна створювати, редагувати, зберігати та завантажувати файли параметрів сонячних елементів, як показано на рисунку 3.

Товщину шарів вводили за експериментальними даними. Властивості матеріалу шарів і контактів були вибрані з літератури (Nykyruy, 2019; Zapukhlyak, 2020; Massamba, 2020) і в деяких випадках, таких як густина станів, густина дефектів, швидкість поверхневої рекомбінації, об'ємний опір, ефективна густина стану і робота виходу металу, були оцінені та

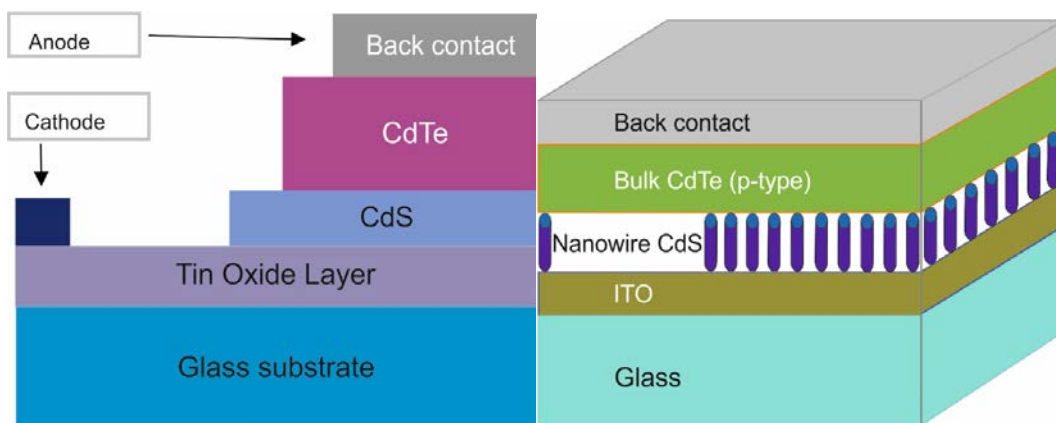


Рис. 1. Схема фотоелектричного перетворювача на основі CdS-nw/CdTe

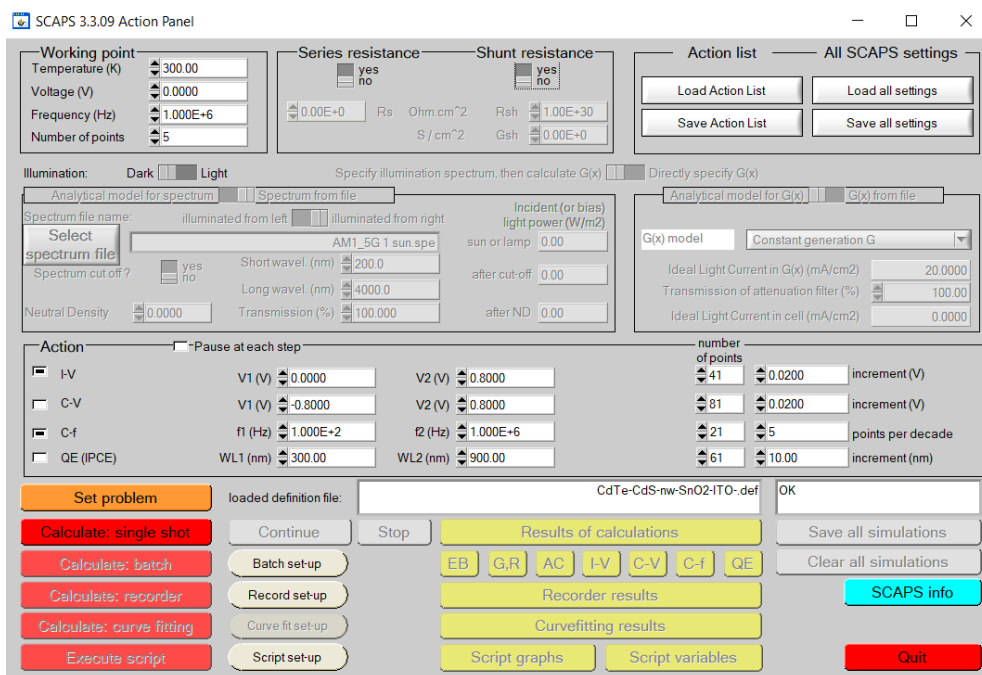


Рис. 2. Головний екран програмного середовища SCAPS

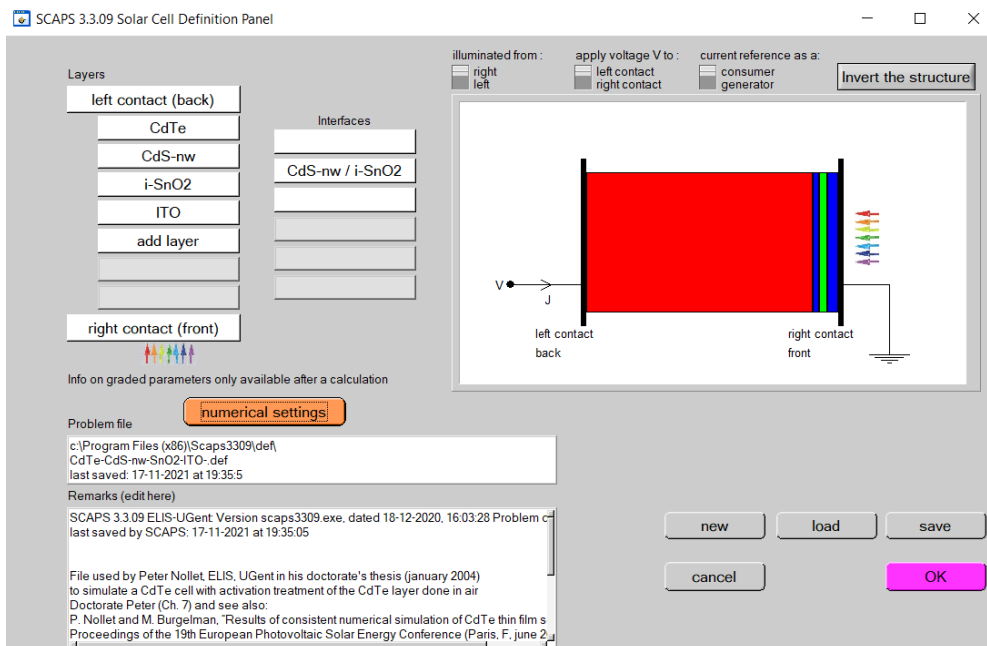


Рис. 3. Вигляд вікна для задання і редагування кожного з шарів фотоелектричного елемента

налаштовано для того, щоб крива відповідала експериментальній кривій I-V при 300K. Тут варто зазначити, що параметри зберігалися однаковими для всіх температур.

Тут слід зазначити, що SCAPS приймає лише параметри тонкого шару, шар нановолокон CdS був представлений як тонкий шар із високим

коефіцієнтом поглинання ($9,6 \times 10^5$). Як зазначалося (Dang, 2014; Shuai, 2020), доведено, що шар нановолокон CdS покращує пропускання світла через віконний шар і покращує поглинання та генерацію носіїв у поглиначі.

Оптична ширина забороненої зони, коефіцієнт поглинання, концентрація носіїв та

Таблиця 1

**Параметри моделювання використані для сонячних елементів з нановолокнами
n-CdS-nw/p-CdTe при 300 К**

Параметри	ITO	i-SnO ₂	n-CdS-nw	p-CdTe
Товщина, нм	150*	40*	120*	3000*
Ширина забороненої зони, еВ	3,65	3,6	3,490	1,5
Спорідненість до електрона, еВ	4,8	4,4	4,0	4,28
Діелектрична проникність (відн.)	8,9	9,0	9,0	10,3
Ефективна густина станів зони провідності, см ⁻³	$5,2 \cdot 10^{18}$	$2,2 \cdot 10^{19}$	$8 \cdot 10^{19}$	$9,2 \cdot 10^{17}$
Ефективна густина станів валентної зони, см ⁻³	$1,0 \cdot 10^{18}$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$8 \cdot 10^{18}$	$5,2 \cdot 10^{18}$
Теплова швидкість електронів (см/с)	$2,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
Теплова швидкість дірок (см/с)	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
Рухливість електронів, см ² /(В·с)	$1,0 \cdot 10^1$	$1,0 \cdot 10^2$	$1,0 \cdot 10^2$	$3,2 \cdot 10^2$
Рухливість дірок, см ² /(В·с)	$1,0 \cdot 10^1$	$2,5 \cdot 10^1$	$2,5 \cdot 10^1$	$4,0 \cdot 10^1$
N _D , см ⁻³	$1,0 \cdot 10^{15}$	$1,0 \cdot 10^{15}$	$1,15 \cdot 10^{17*}$	0
N _A , см ⁻³	0	$1,0 \cdot 10^{15}$	0	$1,0 \cdot 10^{16*}$
Коефіцієнт радіаційної рекомбінації (см ³ /с)	$2,3 \cdot 10^{-11}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$

Примітка: * – змінні параметри.

Таблиця 2

**Параметри дефектів на інтерфейсі,
що використовуються при моделюванні**

Параметри	Інтерфейс CdS-nw/CdTe
Тип дефекту	Акцепторний
Поперечний переріз захоплення електронів (см ²)	$1 \cdot 10^{-13}$
Поперечний переріз захоплення дірок (см ²)	$1 \cdot 10^{-13}$
Енергетичне положення дефекту E _t	Вище E _v CdTe
Рівень енергії щодо еталонного (еВ)	0,100
Загальна густина (см ⁻²)	$1,6 \cdot 10^{12}$

інші вхідні параметри, які використані при моделюванні структури сонячного елемента, використовувались з дослідницьких робіт (Yavorskyi, 2020; Nykyruy, 2019; Ahmmed, 2020), або обчислені експериментально. Властивості матеріалу для кожного шару сонячного елемента з гетеропереходом CdS/CdTe наведені в таблицях 1 та 2. З таблиць також видно, що при моделюванні враховано значну кількість дефектів інтерфейсу, щоб мати більш реалістичний пристрій.

Обговорення результатів.

Дизайн пристрою. Схематична структура сонячного елемента, що складається з планарного CdS, і процес транспортування носіїв заряду показані на рисунках 4 а) і в) відповідно. На рисунку 4 б) і г) показано структуру сонячного елемента nw-CdS. На рисунку 4 г) показано процес транспортування носіїв сонячного елемента nw-CdS/CdTe (Hongmei, 2015). Виготовлений пристрій

складається з нановолокон CdS, вбудованих у прозору матрицю з анодованого оксиду алюмінію (AAO).

Використання матриці AAO і нановолокон CdS у сонячних елементах CdS/CdTe призвело до кращого пропускання падаючого світла, що збільшує струм короткого замикання. Напруга холостого ходу була покращена завдяки зменшенню рекомбінації поверхні розділу та зменшенню ефективного зворотного струму насичення, що стало результатом зменшення площі розділу між нановолокнами CdS та полікристалічним CdTe. Крім того, сонячні елементи nw-CdS/CdTe показали майже ідеальну спектральну реакцію квантової ефективності, а їх надійність була покращена приблизно в 3 рази. Нановолоконні сонячні елементи CdS/CdTe, вирощені через мембрану AAO, можуть покращити здатність до поглинання та генерації носіїв завдяки регулюванню пропускання світла віконного шару та одночасно отримали значні переваги щодо надійності.

Визначення оптимальної товщини шарів.

CdTe є активною частиною сонячного елемента, де відбувається найбільша генерація та накопичення носіїв (рис. 4). При моделюванні товщина цього шару спочатку змінювалася від 0,5 мкм до 12,0 мкм з кроком 0,5 мкм, а потім була встановлена на $d = 3$ мкм, тоді як інші параметри залишалися постійними.

Визначено, що при товщині поглинаючого шару телуриду кадмію $d = 3$ мкм ефективність η досягає максимального значення 12,78% (рис. 5),

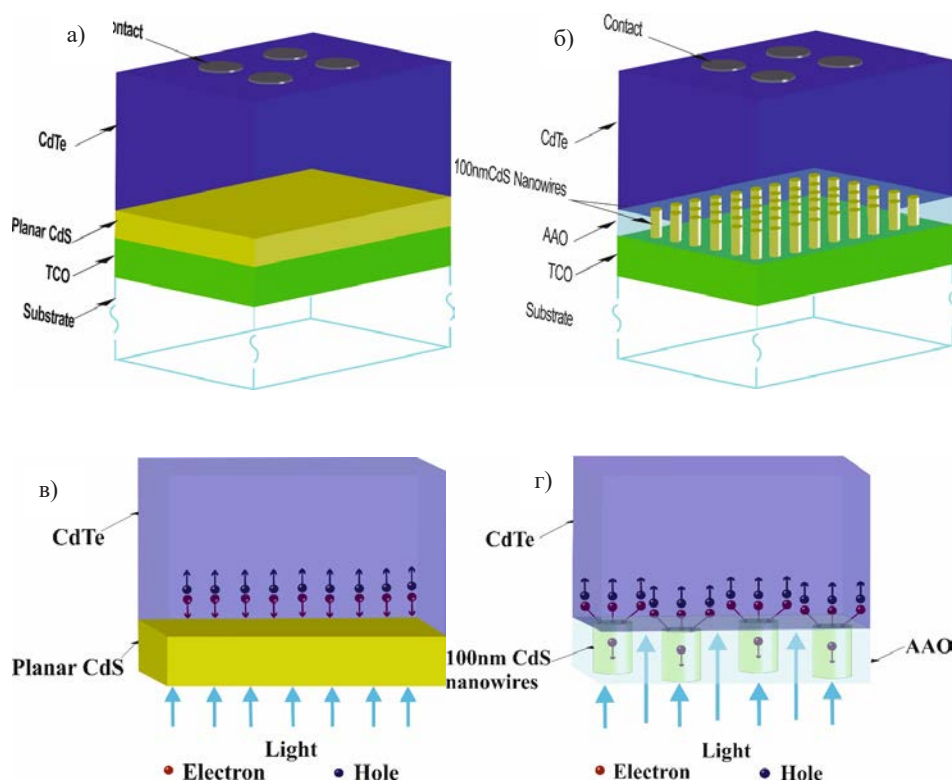


Рис. 4. а) Схематична структура сонячного елемента CdS/CdTe з вертикальним пакетом нановолокон, де світло-блакитний колір позначає ААО з незначним поглинанням, б) Схематична структура планарної сонячної батареї CdS/CdTe, в) Транспортування електронів і дірок через зменшений інтерфейс переходу в сонячному елементі pw CdS/CdTe, г) Транспорт електронів і дірок через інтерфейс переходу в звичайному планарному сонячному елементі CdS/CdTe [18]

а коефіцієнт заповнення FF зростає зі збільшенням товщини і досягає значення $FF=75,81\%$. При збільшенні товщини шару ефективність і фактор заповнення виходить на насичення і суттєво не змінюється.

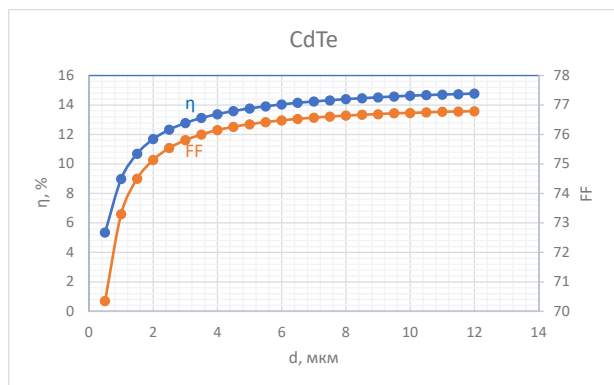


Рис. 5. Зміна ефективності η та FF як функція товщини поглинаючого шару CdTe

Оптимізацію сонячного елемента з гетеро-переходом pw-CdS/CdTe було змодельовано на основі перерахованих вище властивостей поглинаючого та віконного шару у таблиці 1. При моделюванні товщина віконного шару варіювалась від 10,0 нм до 150,0 нм з кроком 10 нм, і була встановлена на $d = 120$ нм. Для цієї товщини спостерігалась найвища ефективність $\eta = 13,16\%$ і фактор заповнення $FF = 76,18$. При збільшенні товщини шару спостерігається не значне зростання фотоелектричних параметрів і вихід на насичення (рис. 6).

Що стосується верхнього провідного шару SnO_2 моделювання проводилось для товщини від 10 нм до 150 нм з кроком 10 нм. Встановлено, що оптимальна товщина шару становить 40 нм, при якій ефективність $\eta = 13,33\%$, а $FF=77,39$. Подальше підвищення товщини призводить до зниження фотоелектричних параметрів (рис. 7).

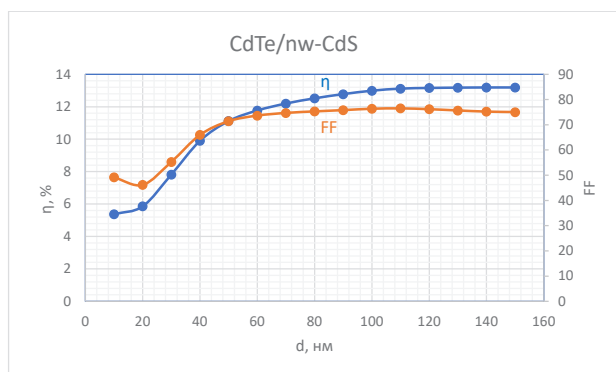


Рис. 6. Зміна ефективності η та FF як функція товщини віконного шару nw-CdS/CdTe

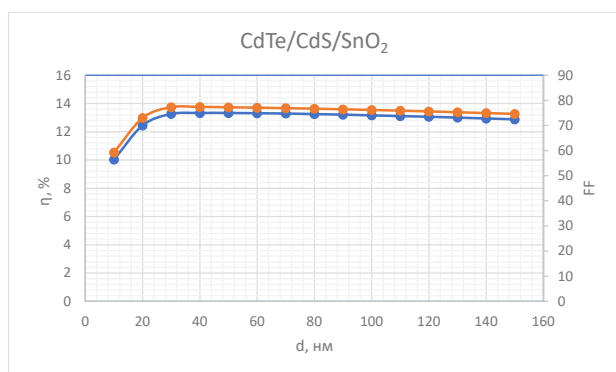


Рис. 7. Зміна ефективності η та FF як функція товщини провідного шару $\text{SnO}_2/\text{nw-CdS/CdTe}$

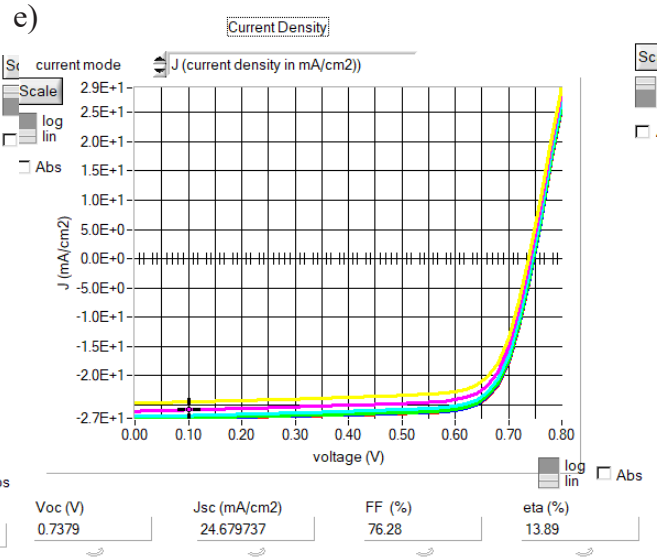
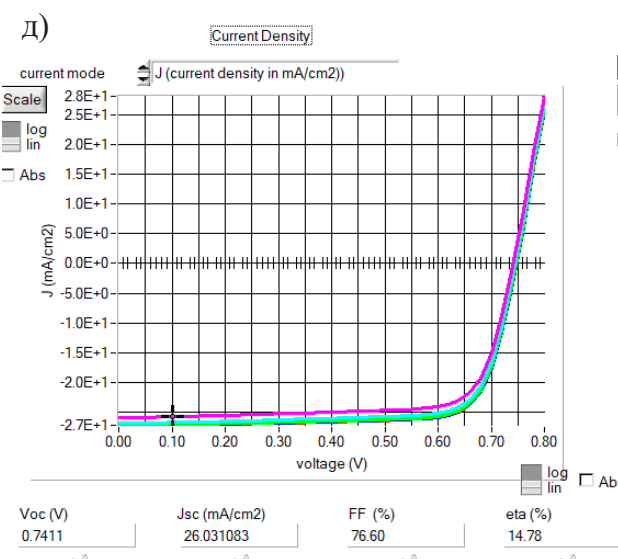
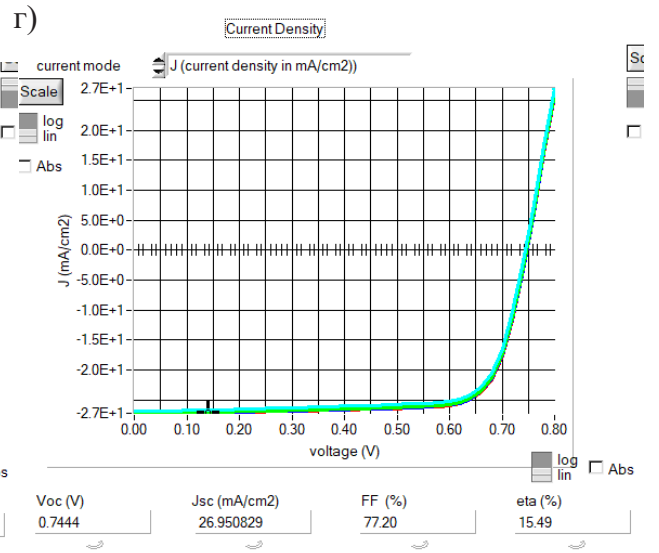
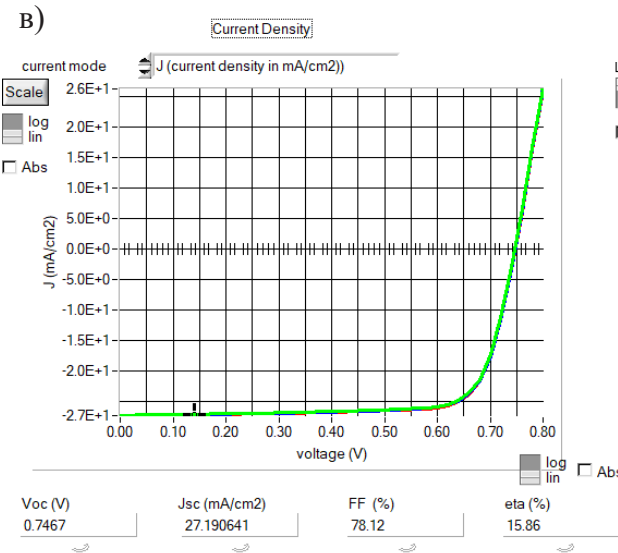
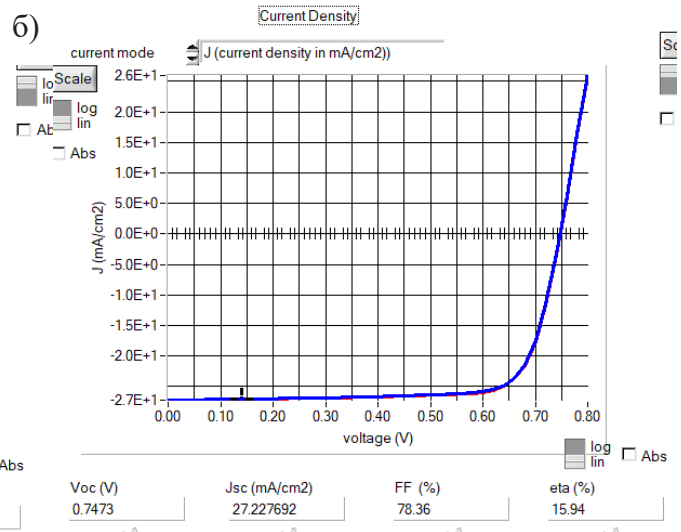
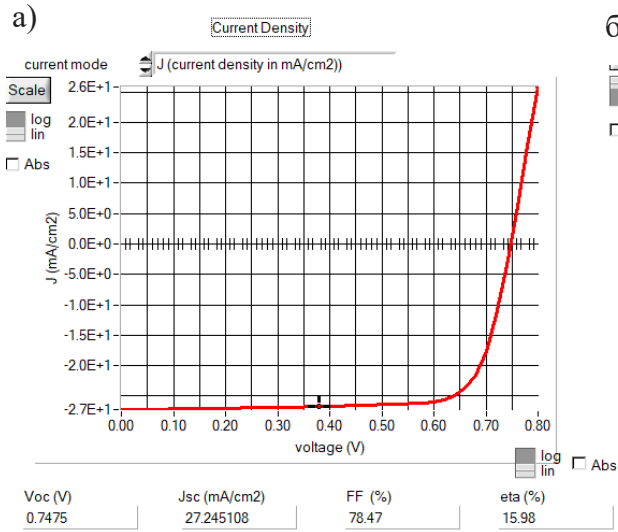
Вплив густини стану інтерфейсу. Заряд Q_{it} у пастках на межі розділу існує в межах забороненої зони через розривання періодичної структури решітки на поверхні кристала (Burgelman, 2004). Q_{it} може бути дуже високим, оскільки густина йонів на межі розділу може бути досить високою, порядку 10^{15} іонів на см^2 . Подібно до об'ємних домішок, інтерфейсна пастка вважається донором, коли вона нейтральна (заповнена електронами) і може стати позитивно зарядженою, віддавши електрон. Інтерфейсна пастка вважається акцептором, коли нейтральна (порожня) і може стати негативно зарядженою, приймаючи електрон.

Щоб вивчити вплив густини міжфазних станів на вольт-амперній характеристиці, густина міжфазних станів (N_{it}) між шарами nw-CdS і CdTe змінювалися в моделюванні в діапазоні від $5,88 \times 10^{11}$ до $6,2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Цей діапазон пов'язаний із змодельованими кривими J-V,

отриманими за допомогою SCAPS-1D без збою конвергенції. У цій моделі тип дефекту стану межі розділу розглядається як акцептор з однорівневим розподілом енергії. Рисунок 8 показує змодельовані J-V характеристики сонячного елемента для діапазону густин міжфазних станів.

На рисунку 5 показано змодельовані вольт-амперні криві, із значеннями V_{oc} , J_{sc} , FF та ефективності при різних густинах стану розділу. Струм рекомбінації інтерфейсу збільшує темновий струм насичення сонячного елемента та знижує ефективність комірки. Таким чином, це зменшує струм короткого замикання і, отже, ефективність сонячного елемента (Burgelman, 2004; Burgelman 2008). Як видно з рисунка 8, V_{oc} і J_{sc} зменшуються зі збільшенням загальної густини станів розділу, і, таким чином, ефективність знижується.

Висновки. Проведено дослідження фотоелектричної комірки $\text{ITO/SnO}_2/\text{nw-CdS/CdTe}$ на основі шару із нановолокон nw-CdS за допомогою програмного середовища SCAPS 3.3.09. Результати моделювання показують, що введення шару nw-CdS значно покращує вихідні параметри, а отже, і ефективність фотоелектричної комірки. Ефективність перетворення енергії (PCE) сонячного елемента $\text{ITO/SnO}_2/\text{nw-CdS/CdTe}$ становить приблизно 13,33%, а фактор заповнення сягає значення $FF = 77,39$. Встановлено, що сонячні елементи на основі нановолокон nw-CdS/CdTe, можуть покращити здатність до поглинання та генерації носіїв завдяки регулюванню пропускання світла віконного шару та одночасно отримати значні переваги щодо надійності. Показано вплив густини дефектних станів змінювалася від $5,88 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $6,2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, де положення дефектного стану враховувалося на рівні E_v з гаусовим енергетичним розподілом. Можна помітити, що збільшення рівня дефектного стану головним чином впливає на напругу холостого ходу і струм короткого замикання, що викликає падіння ефективності пристрою. Отже, густина дефектних станів може бути розрахована до 10^{12} см^{-2} , оскільки поза цим рівнем ефективність сонячного елемента $\text{ITO/SnO}_2/\text{nw-CdS/CdTe}$ значно погіршується.



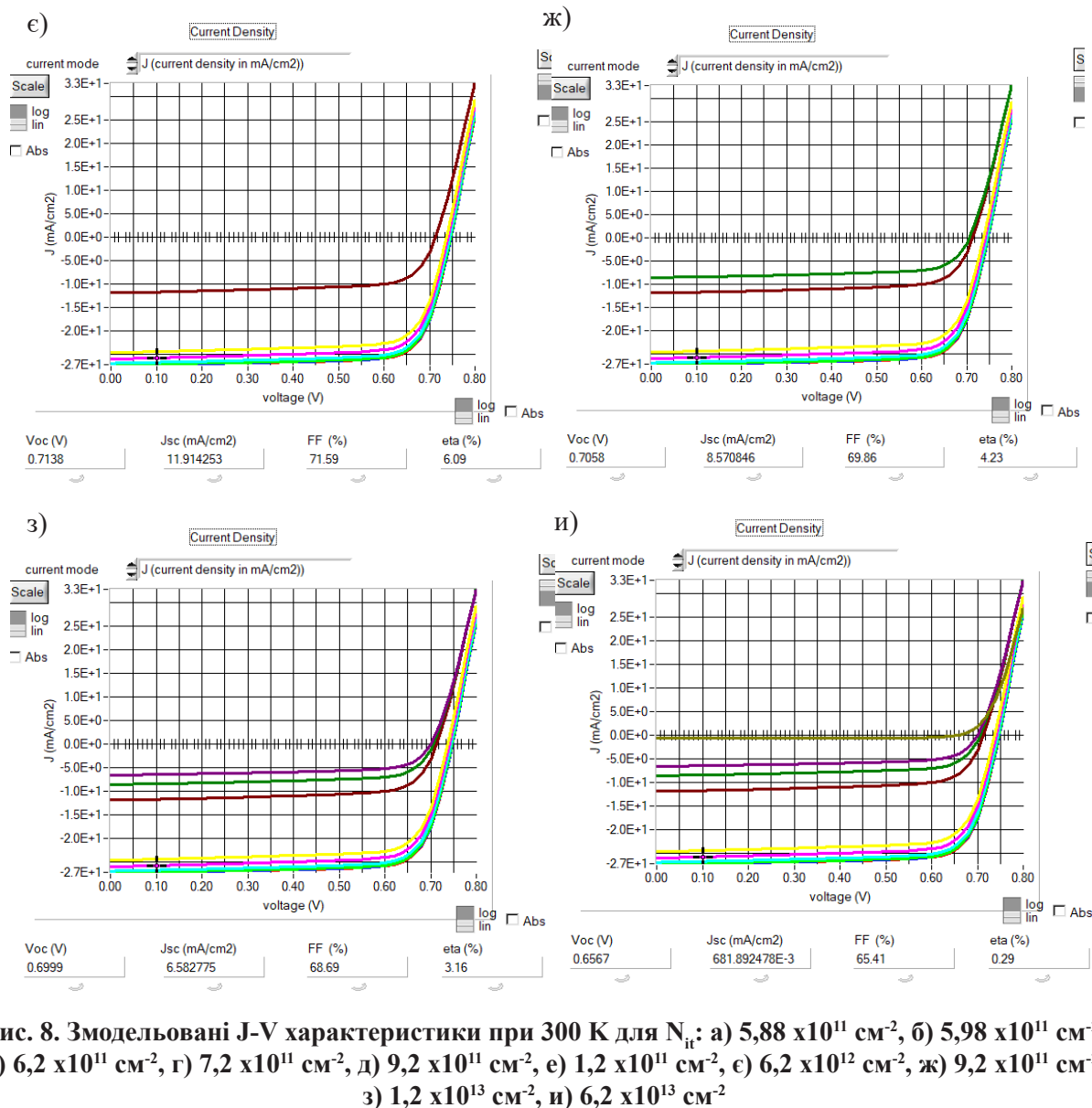


Рис. 8. Змодельовані J-V характеристики при 300 К для N_{it} : а) $5,88 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, б) $5,98 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, в) $6,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, г) $7,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, д) $9,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, е) $1,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, є) $6,2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, ж) $9,2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, з) $1,2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, и) $6,2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$

ЛІТЕРАТУРА:

1. Wisz G., Nykyruy L., Yakubiv V., Hryhoruk I., Yavorskyi R. Impact of Advanced Research on Development of Renewable Energy Policy: Case of Ukraine. *International Journal of Renewable Energy Research* 2018. 8(4). P. 2367–2384.
2. Lee, Taesoo D., and Abasifreke U. Ebong. A review of thin film solar cell technologies and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2017. 70. P. 1286–1297.
3. Green M. A. et al. Solar cell efficiency tables. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2024. T. 32.(7). P. 425–441.
4. Hiscock G., Earth Wars: the Battle for Global Resources. *John Wiley & Sons, Singapore*, 2012.
5. Scarpulla, Michael A., et al. CdTe-based thin film photovoltaics: Recent advances, current challenges and future prospects. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2023. V.255. P.112289.
6. Bertoncello, Matteo, et al. Influence of CdTe solar cell properties on stability at high temperatures. *Microelectronics Reliability* 2020. V. 114. P.113847.
7. Yavorskyi R. Features of optical properties of high stable CdTe photovoltaic absorber layer. *Physics and Chemistry of Solid State* 2020. Vol. 21, No. 2. P. 243–253.
8. Dang H., Singh V. P., Guduru S., Hastings J. T. Embedded nanowire window layers for enhanced quantum efficiency in window absorber type solar cells like CdS/CdTe. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2016. V.144. P. 641–651.
9. Dang, Hongmei, et al. Cadmium sulfide nanowire arrays for window layer applications in solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2014. V.126. P. 184–191.

10. Guo, Shuai, et al. Tunable optical loss and multi-band photodetection based on tin doped CdS nanowire. *Journal of Alloys and Compounds* 2020. V. 835. P. 155330.
11. Burgelman M., Verschraegen J., Degraeve S., Nollet P. Modeling thin-film PV devices. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 2004. V12 (2-3). P. 143–153.
12. Burgelman M., Marlein J. Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS, Proc. Of the 23rd Eur. *Photovolt. Sol. Energy Conf., Valencia* 2008. pp. 2151–2155.
13. Verschraegen J., Burgelman M. Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS. *Thin Solid Films* 2007. V.515 (15) V. 6276–6279.
14. Nykyruy L. I., Yavorskyi R. S., Zapukhlyak Z. R., Wisz G., Potera P. Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties. *Optical Materials*. 2019. Vol. 92. P. 319–329.
15. Zapukhlyak Z. R., Nykyruy L. I., Wisz G., Rubish V. M., Prokopiv V. V., Halushchak M. O., Yavorskyi R. S. SCAPS modelling of ZnO/CdS/CdTe/CuO photovoltaic heterosystem. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 21(4). P. 660–668.
16. Seck, Serigne Massamba, et al. Study of efficiencies CdTe/CdS photovoltaic solar cell according to electrical properties by scaps simulation. *Natural Resources* 2020. P.47.
17. Ahmmed S., Aktar A., Rahman M.F., Hossain J., Ismail A.B.M. A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cells using NiO HTL and ZnO TCO. *Optik (Stuttg)*. 2020b. Vol.223. P.165625.
18. Hongmei Dang, Nanostructured Semiconductor Device Design in Solar Cells”, *Ph.D. Thesis, University of Kentucky* 2015. P. 77.

REFERENCES:

1. Wisz, G., Nykyruy, L., Yakubiv, V., Hryhoruk, I., & Yavorskyi, R. (2018). Impact of Advanced Research on Development of Renewable Energy Policy: Case of Ukraine. *International Journal of Renewable Energy Research*, 8(4). P. 2367-2384.
2. Lee, Taesoo D., and Abasifreke U. (2017). Ebong. A review of thin film solar cell technologies and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 70. P. 1286–1297.
3. Green M. A. et al. (2024). Solar cell efficiency tables. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. T. 32.(7). P. 425–441.
4. Hiscock, G. (2012). Earth Wars: the Battle for Global Resources. *John Wiley & Sons, Singapore*.
5. Scarpulla, Michael A., et al. (2023). CdTe-based thin film photovoltaics: Recent advances, current challenges and future prospects. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, V.255. P.112289.
6. Bertoncello, Matteo, et al. (2020). Influence of CdTe solar cell properties on stability at high temperatures. *Microelectronics Reliability*, V. 114. P.113847.
7. Yavorskyi, R. (2020). Features of optical properties of high stable CdTe photovoltaic absorber layer. *Physics and Chemistry of Solid State*, Vol. 21, No. 2. P. 243–253.
8. Dang, H., Singh, V. P., Guduru, S., & Hastings J. T. (2016). Embedded nanowire window layers for enhanced quantum efficiency in window absorber type solar cells like CdS/CdTe. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, V.144. P. 641–651.
9. Dang, Hongmei, et al. (2014). Cadmium sulfide nanowire arrays for window layer applications in solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, V.126. P. 184–191.
10. Guo, Shuai, et al. (2020). Tunable optical loss and multi-band photodetection based on tin doped CdS nanowire. *Journal of Alloys and Compounds*, V. 835. P. 155330.
11. Burgelman, M., Verschraegen, J., Degraeve, S., & Nollet, P. (2004). Modeling thin-film PV devices. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* V12 (2-3). P. 143–153.
12. Burgelman, M., & Marlein, J. (2008). Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS, Proc. Of the 23rd Eur. *Photovolt. Sol. Energy Conf., Valencia*, pp. 2151–2155.
13. Verschraegen, J., & Burgelman, M. (2007). Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS. *Thin Solid Films*, V.515 (15) V. 6276–6279.
14. Nykyruy, L. I., Yavorskyi, R. S., Zapukhlyak, Z. R., Wisz, G., & Potera, P. (2019). Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties. *Optical Materials*. Vol. 92. P. 319–329.
15. Zapukhlyak, Z. R., Nykyruy, L. I., Wisz, G., Rubish, V. M., Prokopiv, V. V., Halushchak, M. O., & Yavorskyi, R. S. (2020). SCAPS modelling of ZnO/CdS/CdTe/CuO photovoltaic heterosystem. *Physics and Chemistry of Solid State*. Vol. 21(4). P. 660–668.
16. Seck, Serigne Massamba, et al. (2020). Study of efficiencies CdTe/CdS photovoltaic solar cell according to electrical properties by scaps simulation. *Natural Resources*, P.47.
17. Ahmmed, S., Aktar, A., Rahman, M.F., Hossain, J., & Ismail, A.B.M. (2020b). A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cells using NiO HTL and ZnO TCO. *Optik (Stuttg)*. Vol.223. P.165625.
18. Hongmei Dang (2015). Nanostructured Semiconductor Device Design in Solar Cells”, *Ph.D. Thesis, University of Kentucky*, P. 77.

ЗМІСТ

Василь ВЕЛИЧКО, Ніна ГОЛОВІНА, Оксана ОСТРЕЙ

ЗАДАЧІ НА ВІЙСЬКОВУ ТЕМАТИКУ, ЩО РОЗКРИВАЮТЬ СУТЬ
ФІЗИЧНИХ ОСНОВ ФУНКЦІОНУВАННЯ РАДІОЕЛЕКТРОННОЇ БОРОТЬБИ.....3

В'ячеслав ВОЛОШИН

ПРО ОДНУ ОСОБЛИВІСТЬ ПРИНЦИПУ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ ДВОЄДИНОСТІ
ЯК ПРИЧИНИ ПОЯВИ ПРОМИСЛОВИХ ВІДХОДІВ.....12

Ігор ЖАБРОВЕЦЬ, Олександр МАРТИНЮК

ОСНОВНІ ТЕНДЕНЦІЇ ВПРОВАДЖЕННЯ КОНЦЕПЦІЇ STEM В ОСВІТНЬОМУ ПРОЦЕСІ З ФІЗИКИ...19

Дмитро ІВАНЮК, Олег ХИЖУН, Людмила ПІСКАЧ,

Андрій КЕВШИН, Назар КЕВШИН

ЕЛЕКТРОННІ ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПОЧЕТВЕРЕННОГО СУЛЬФІДУ TL_2HgSnS_4 27

Максим КИРИЧЕНКО, Галина МИРОНЧУК

ОПТИЧНІ ТА НЕЛІНІЙНО-ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СТЕКОЛ СИСТЕМИ $GeS_2-As_2S_3-Er_2S_3$35

Юрій ЛУЦЮК

ТЕМПЕРАТУРНІ ЗАЛЕЖНОСТІ УСЕРЕДНЕНИХ ГРУПОВИХ ШВИДКОСТЕЙ АКУСТИЧНИХ
ФОНОНІВ У ПЛОСКИХ НАНОПЛІВКАХ ДИЙОДИДУ СВИНЦЮ 40

Тарас МЕЛЬНИЧУК, Галина МИРОНЧУК

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ $AgGaGe_3Se_8$ ЛЕГОВАНИХ Dy.....47

Мирон РУДИШ, Андрій КАШУБА

ВПЛИВ ГІДРОСТАТИЧНОГО ТИСКУ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ КРИСТАЛА $CuAlTe_2$56

Олександр ТИМОЩУК

ТЕОРЕТИКО-МЕТОДОЛОГІЧНІ ОСНОВИ РАДІАЦІЙНОЇ ОСВІТИ В ЗАКЛАДАХ ВИЩОЇ ОСВІТИ.65

Petro TROKHIMCHUK

PROBLEMS OF MODELING A CRITICAL THERMONUCLEAR PROCESSES71

Ростислав ЯВОРСЬКИЙ, Андрій КАШУБА, Лілія ЯВОРСЬКА, Оксана ЗАМУРУЄВА

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ НАНОВОЛОКОН CdS НА ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЕЛЕКТРИЧНОГО
ПЕРЕТВОРЮВАЧА II ПОКОЛІННЯ.....79

CONTENTS

Vasyl VELYCHKO, Nina HOLOVINA, Oksana OSTREI MILITARY-THEMED PROBLEMS REVEALING THE PHYSICAL FOUNDATIONS OF ELECTRONIC WARFARE OPERATIONS.....	3
Vyacheslav VOLOSHYN ON ONE PECULIARITY OF THE PRINCIPLE OF THERMODYNAMIC DUALITY AS A CAUSE OF INDUSTRIAL WASTE.....	12
Ihor ZHABROVETS, Oleksandr MARTYNIUK MAIN TRENDS IN THE IMPLEMENTATION OF THE STEM CONCEPT IN THE EDUCATIONAL PROCESS IN PHYSICS.....	19
Dmytro IVANYUK, Oleg KHYZHUN, Lyudmyla PISKACH, Andriy KEVSHYN, Nazar KEVSHYN ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF QUATERNARY SULFIDE TL_2HgSnS_4	27
Maxym KYRYCHENKO, Galyna MYRONCHUK OPTICAL AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES GLASSES OF THE $GeS_2-As_2S_3-Er_2S_3$ SYSTEM...35	
Yuriy LUTSIUK TEMPERATURE DEPENDENCES OF THE AVERAGED GROUP VELOCITIES OF ACOUSTIC PHONONS IN FLAT NANOFILMS OF LEAD DIIODIDE.....	40
Taras MELNYCHUK, Galyna MYRONCHUK OPTICAL PROPERTIES OF DY-DOPED $AgGaGe_3Se_8$ CRYSTALLITES.....	47
Myron RUDYSH, Andrii KASHUBA INFLUENCE OF HYDROSTATIC PRESSURE ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE $CuAlTe_2$ CRYSTAL.....	56
Oleksandr TYMOSHCHUK THEORETICAL AND METHODOLOGICAL FOUNDATIONS OF RADIATION EDUCATION IN HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS.....	65
Petro TROKHIMCHUCK PROBLEMS OF MODELING A CRITICAL THERMONUCLEAR PROCESSES	71
Rostyslav YAVORSKYI, Andrii KASHUBA, Lilia YAVORSKA, Oksana ZAMURUEVA MODELING THE INFLUENCE OF CDS NANOWIRES ON THE PROPERTIES OF A SECOND-GENERATION PHOTOVOLTAIC CONVERTER.....	79

ФІЗИКА ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Випуск 2

Коректура • Ірина Миколаївна Чудеснова

Комп'ютерна верстка • Наталія Сергіївна Кузнєцова

Формат 60x84/8. Гарнітура Times New Roman. Підписано до друку: 01.11.2024.
Папір офсет. Цифровий друк. Ум. друк. арк. 10,69. Замов. № 0125/029. Наклад 300 прим.

Видавництво і друкарня – Видавничий дім «Гельветика»

65101, Україна, м. Одеса, вул. Інглєзі, 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.