

Волинський національний університет
імені Лесі Українки

ФІЗИКА ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Випуск 2



Видавничий дім
«Гельветика»
2022

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 Ченстоховій, 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
24.11.2022 р., протокол № 14

Науковий журнал «Фізика та освітні технології»
zareєстровано Міністерством юстиції України
(Свідоцтво про державну реєстрацію друкованого засобу масової інформації
серія КВ № 24970–14910Р від 30.08.2021 року)

«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, 2022

УДК 372.853

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-1>

Ігор ВЕРГУН

аспірант, Центральноукраїнський державний університет імені Володимира Винниченка, вул. Шевченка, 1, Кропивницький, Кіровоградська область, 25000

ORCID ID: 0000-0003-3866-9597

Бібліографічний опис статті: Вергун, І. (2022). Організація педагогічного експерименту з упровадження методики навчання фізики на засадах білінгвального підходу. *Фізика та освітні технології*, 2, 3–8, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-1>

ОРГАНІЗАЦІЯ ПЕДАГОГІЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ З УПРОВАДЖЕННЯ МЕТОДИКИ НАВЧАННЯ ФІЗИКИ НА ЗАСАДАХ БІЛІНГВАЛЬНОГО ПІДХОДУ

У статті презентується організація та результати проведення педагогічного експерименту з упровадження розробленої методики навчання фізики на засадах білінгвального підходу в освітньому процесі закладів загальної середньої освіти. Також дано визначення педагогічного експерименту. Педагогічний експеримент охоплював констатувальний, пошуковий, формувальний та контрольний етапи дослідження. Під час проведення експерименту було використано методи спостереження, анкетування, тестування, експеримент, статистичні методи опрацювання результатів. Для організації тестування в дистанційній формі використовувався сервіс Google forms та тести різних типів: вибір одного варіанту, множинний вибір, правильно/неправильно, на встановлення відповідності. У статті продемонстрована діаграма розподілу учнів в контрольних та експериментальних групах за рівнем навчальних досягнень, яка вказує на ефективність запропонованої методики. Результати педагогічного експерименту підтвердили статистичну достовірність впливу запропонованої методики на якісні показники формування ключових компетентностей та позитивні зрушення у засвоєнні учнями навчального матеріалу з фізики. Суттєві зрушення виявлені в формуванні таких ключових компетентностей як: уміння вчитися впродовж життя, інформаційно-цифрова компетентність, спілкування іноземною мовою. Також впровадження розробленої нами методики сприяє: підвищенню мотивації учнів до навчання, зацікавленості до вивчення фізики, розвитку критичного мислення, удосконаленню вмінь учнів використовувати всі доступні інформаційні джерела для вирішення поставлених задач, наприклад, навчальних проектах, розвитку вмінь використовувати у процесі вивчення фізики прикладне програмне забезпечення, виробленню навичок комунікабельності, роботи в групі, навчальній комунікації тощо.

Ключові слова: педагогічний експеримент, наскрізні поняття, білінгвальний підхід, методика навчання фізики, заклади загальної середньої освіти.

Ihor VERHUN

Postgraduate Student, Volodymyr Vynnychenko Central Ukrainian State University, St. Shevchenko, 1, Kropyvnytskyi, Kirovohrad region, 25000

ORCID ID: 0000-0003-3866-9597

To cite this article: Vergun, I. (2022). Orhanizatsiia pedahohichnoho eksperymentu z uprovadzhennia metodyky navchannia fizyky na zasadakh bilinhvalnoho pidkходу [The organization of a pedagogical experiment on the implementation of the methodology of teaching physics based on the principles of a bilingual approach]. *Physics and Educational Technology*, 2, 3–8, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-1>

ORGANIZATION OF A PEDAGOGICAL EXPERIMENT ON THE IMPLEMENTATION OF THE METHODOLOGY OF TEACHING PHYSICS ON THE BASIS OF A BILINGUAL APPROACH

The article presents the organization and results of a pedagogical experiment on the implementation of the developed methodology of teaching physics based on the bilingual approach in the educational process of general secondary education institutions. The definition of a pedagogical experiment is also given. Pedagogical experiment covered ascertaining, search, formative and control stages of research. During the experiment, the methods of observation, questionnaire, testing, experiment, and statistical methods of processing the results were used. The Google forms service and various types of tests were used to organize remote testing: single-choice, multiple-choice, right/wrong, to establish compliance.

The article shows a diagram of the distribution of students in control and experimental groups according to the level of educational achievements, which indicates the effectiveness of the proposed method. The results of the pedagogical experiment confirmed the statistical reliability of the influence of the proposed method on the qualitative indicators of the formation of key competences and positive changes in students' assimilation of educational material in physics. Significant changes were found in the formation of such key competencies as: the ability to learn throughout life, information and digital competence, communication in a foreign language. Also, the implementation of the methodology developed by us contributes to: increasing students' motivation to study, interest in studying physics, developing critical thinking, improving students' ability to use all available information sources to solve tasks, for example, educational projects, developing skills to use applied software in the process of studying physics, development of communication skills, group work, educational communication, etc.

Key words: pedagogical experiment, cross-cutting concepts, bilingual approach, teaching method of physics, institutions of general secondary education.

Актуальність проблеми. Нині Україна як ніколи потребує освічену молодь, яка стане рушієм економіки. Особливо гостро стоїть питання забезпечення висококваліфікованими спеціалістами в технічній сфері. Тому освітній процес із природничих дисциплін повинен бути якісний та розвивати основні компетентності, які формують конкурентно спроможного спеціаліста на світовому ринку праці. А отже, освітній процес у школах повинен відповідати сучасним вимогам суспільства. На разі постає проблема вдосконалення методики навчання фізики, як основи розвитку сучасних технологій, в закладах загальної середньої освіти (ЗЗСО). Нами (Вергун І. В., 2019) обґрунтована потреба реалізації методики навчання фізики у ЗЗСО, розроблена на основі білінгвального підходу та спрямована як на наскрізні лінії та поняття фізики, так і на розвиток міждисциплінарної інтеграції й інформатизації. Ця методика відрізняється від інших формуючи ключові компетентності з фізики на основі білінгвального підходу. Тому для виявлення впливу розробленої нами методики навчання фізики на основі білінгвального підходу (Вергун І. В., 2019) на якість навчання постала потреба провести відповідне експериментальне дослідження.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У процесі планування, організації та проведення педагогічного експерименту ми спиралися на теоретичні засади експериментальних досліджень у педагогіці, визначені у працях С.У. Гончаренка (Гончаренко С. У., 2008), З.Н. Курлянд, В.К. Сидоренка, П.В. Дмитренко та ін. Проблему вдосконалення методики навчання фізики досліджували: П.С. Атаманчук, О.І. Бугайов, С.У. Гончаренко, Є. В. Коршак, М.Т. Мартинюк, О.С. Мартинюк, Н. В. Подопрігора, М. І. Садовий, В. П. Сергієнко, О. М. Трифонова (Садовий М. І., 2012), (Трифорова О. М., 2014) та ін.

Проведені нами дослідження (Вергун І. В., 2019) показали, що проблемою запровадження в освітній процес білінгвального підходу (БП) займалися Є. В. Веневцева, Г. М. Вишневецька, А. В. Гагарин, А. М. Гусак, А. О. Ковальчук та ін. Враховуючи тривале вивчення проблеми дослідження (Вергун І. В., 2019) та на основі вивчення досвіду роботи вчителів фізики, ми дійшли до висновку, що проблема формування наскрізних понять на засадах білінгвального підходу потребує детального вивчення, розробки відповідного методичного супроводу та проведення педагогічного експерименту з перевірки ефективності такої методики навчання.

Метою дослідження є організація, проведення та аналіз результатів педагогічного експерименту щодо впровадження методики навчання наскрізних понять з фізики в освітньому процесі на засадах білінгвального підходу.

Дослідження проводиться відповідно до тематичного плану наукових досліджень Лабораторії дидактики фізики, технологій та професійної освіти Інституту педагогіки НАПН України у Центральноукраїнському державному педагогічному університеті імені Володимира Винниченка і є складовою тем «Теоретико-методичні основи навчання фізики і технологій у загальноосвітніх і вищих навчальних закладах» (номер держ. реєстр. 0116U005381, з 2016–2020 рр.) та «Хмаро орієнтована віртуалізація навчального експерименту з фізики в профільній школі» (номер держ. реєстр. 0116U005382, 2016–2018 рр.).

Виклад основного матеріалу дослідження. Під час організації педагогічного експерименту ми опиралися на праці С.У. Гончаренка (Гончаренко С. У., 2008) та М. І. Садового (Садовий М. І., 2001), в яких висвітлено основні вимоги та етапи педагогічного експерименту. Педагогічний експеримент – науково-поставлений

досвід у сфері навчальної або виховної роботи з метою пошуку нових, більш ефективних способів вирішення педагогічної проблеми. Традиційні етапи педагогічного експерименту:

- констатувальний;
- пошуковий;
- формувальний (Вергун І. В. , 2020).

Під час проведення ми дотримувалися відповідно цих трьох етапів.

Педагогічний експеримент проводився впродовж 2019 – 2022 років.

На *констатувальному етапі* дослідження (2019 – 2020) вивчалися теоретичні засади та практичні напрацювання щодо проблеми формування ключових компетентностей з фізики на основі білінгвального підходу, а саме було опрацьовано нормативні документи, які регламентують організацію освітнього процесу з фізики; навчально-методичне забезпечення освітнього процесу з фізики в ЗЗСО; поняттєвий апарат дослідження; досліджено рівень готовності учнів до впровадження розробленої методики навчання фізики на основі білінгвального підходу і встановлено (Вергун І. В. , 2019).

Найбільшу увагу на констатувальному етапі дослідження було приділено: дослідженню застосуванню білінгвального підходу в освітньому процесі з фізики; удосконаленню методики її навчання на засадах білінгвального підходу; вивченню питання формування ключових компетентностей з фізики в учнів в білінгвально-орієнтованому освітньому середовищі.

Завдання *пошукового етапу* дослідження (2020–2021) полягали у: вивчення шляхів застосування та реалізації білінгвального підходу в навчанні фізики в ЗЗСО; вивченні провідних форм, засобів і методів навчання у білінгвально-орієнтованому освітньому середовищі з фізики; розробка методики навчання фізики старшокласників у білінгвально-орієнтованому освітньому середовищі.

При цьому створювалися методичні матеріали для організації (Вергун І. В. , 2020, 2021) таких видів діяльності як лабораторна робота та розв’язування задач, також проводилася апробація й коригування елементів методики, уточнювались основні форми діяльності учнів та педагогів у білінгвально-орієнтованому освітньому середовищі з фізики.

На підсумковому (формувальний) етапі педагогічного експерименту (2021 – 2022) здійснено

перевірку ефективності методики навчання фізики на засадах білінгвального підходу через проведення педагогічного експерименту. Були сформовані контрольні та експериментальні класи; здійснено методичну підготовку вчителів фізики до впровадження розробленої нами методики в освітній процес; організовувалися он-лайн лекції, консультації з питань впровадження методики; проведено контрольний зріз.

У ході наших досліджень нами розроблені тестові завдання (Вергун І. В. , 2020, 2021) з курсу фізики в ЗЗСО на розуміння наскрізних понять, які стали основою для проведення педагогічного експерименту та визначення рівня навчальних досягнень учнів. Тестові завдання ми розділили на 8 тем (табл. 1), які охоплюють увесь матеріал передбачений до опанування відповідно до шкільних навчальних програм з фізики 10-11 класів (МОН, 2017), що затверджені Міністерством освіти та науки України, також виокремлені наскрізні поняття кожного розділу.

Таблиця 1

Основні наскрізні поняття тестових завдань

Теми тестових завдань	Основні наскрізні поняття
Тема 1. Механіка	<ul style="list-style-type: none"> • Відстань • Швидкість • Час • Рух • Частота
Тема 2. Елементи спеціальної теорії відносності	<ul style="list-style-type: none"> • Маса • Сила • Енергія • Дефект мас
Тема 3. Молекулярна фізика та термодинаміка	<ul style="list-style-type: none"> • Густина • Температура • Об’єм • Тиск
Тема 4. Електричне поле	<ul style="list-style-type: none"> • Заряд • Напруженість • Сила
Тема 5. Електродинаміка	<ul style="list-style-type: none"> • Магнітне поле • Сила • Робота
Тема 6. Електромагнітні коливання та хвилі	<ul style="list-style-type: none"> • Електромагнітні коливання • Частота • Період
Тема 7. Оптика	<ul style="list-style-type: none"> • Світло • Яскравість • Промінь • Хвиля • Коливання • Лінза • Фокус
Тема 8. Атомна та ядерна фізика	<ul style="list-style-type: none"> • Ядро • Атоми • Нейтрино • радіоактивність

Тестування проводилося в дистанційному форматі за допомогою Google Forms. Тестові завдання представлені в чотирьох типах: вибір одного варіанту, множинний вибір, правильно/неправильно, на встановлення відповідності. Вибір одного варіанту – дозволяє вибирати одну вірну відповідь зі списку. Множинний вибір – дозволяє вибирати одну або декілька відповідей з наданого списку. Правильно / Неправильно – проста форма питання з множинним вибором тільки з двома варіантами вибору: «Правильно» і «Неправильно». Встановлення відповідності – відповідь на кожне під запитання має бути вибрана із заданого списку можливих відповідей.

Ми сформували контрольну та експериментальну групи таким чином, що до контрольної групи належали учні, що навчались за традиційною методикою; до експериментальної групи належали учні, що навчались у білінгвально-орієнтованому освітньому середовищі.

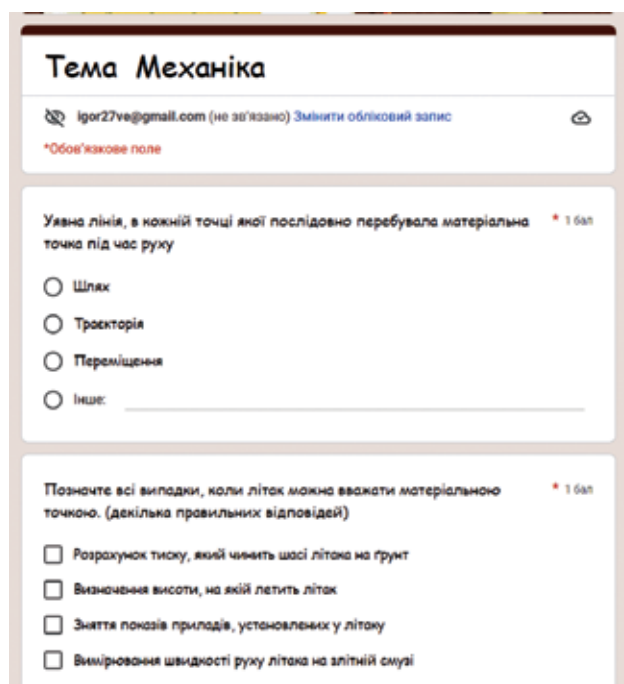


Рис. 1. Тест з теми «Механіка»

На початок проведення педагогічного експерименту було здійснено вибір груп на основі аналізу розподілу учнів за рівнем навчальних досягнень. До участі в педагогічному експерименті було залучено 347 учнів 10 класів різних ЗЗСО: 175 учнів – експериментальна група; 172 – контрольна. Ми використали критерій Пірсона (χ^2) для статистичного обґрунтування

відсутності відмінностей між розподілом контрольною та експериментальною групами за рівнем навчальних досягнень з фізики. Підрахунки виконувалися в Microsoft Excel (рис. 2).

По таблиці критичних значень критерію Пірсона находимо критичне значення: при $df = 3$ і рівень помилки 0,05 критичне значення $\chi^2 = 7,81$.

Отримане нами значення $\chi^2 = 13,82$ більше критичного, а отже, нульова гіпотеза відкидається та приймається альтернативна гіпотеза, це означає якщо впровадити у процес навчання розроблену нами методику очікується вищий рівень формування ключових компетентностей з фізики в учнів.

U-критерій Манна-Уїтні – цей критерій є найпотужнішим непараметричним аналогом t-критерію Стьюдента для незалежних вибірок. У деяких випадках його потужність може бути навіть більшою, ніж у t-критерію. Даний критерій був використаний нами для оцінки ефективності запровадженої методики навчання фізики у білінгвально-орієнтованому освітньому середовищі. Обчислення критерію здійснюють за формулами:

$$U_1 = n_1 n_2 + n_1 (n_1 + 1) / 2 - R_1;$$

$$U_2 = n_1 n_2 + n_2 (n_2 + 1) / 2 - R_2;$$

де R_1, R_2 – суми рангів вибірок; n_1, n_2 – кількість елементів у них.

Для його розрахунків використовували Microsoft Excel (рис. 3).

До експерименту опрацювавши результати отримано $U_{emp} = 20050$, це емпіричне значення знаходиться в зоні не значущості, так як перевищує $U_{кр} = 19070$. Порівнюючи результати після проведення експерименту показують прогрес в оцінці ефективності навчального процесу, так як складає $U_{emp} = 11030$ і знаходиться в зоні значущості. Дані результати підтверджують ефективність запропонованої методики.

Висновки з дослідження і перспективи подальших розробок. У результаті проведеного педагогічного експерименту щодо методики навчання фізики на основі білінгвального підходу в освітньому процесі ми розрахували два критерія критерій Пірсона $\chi^2 = 13,82$ та U-критерій Манна-Уїтні $U_{emp} = 11030$ їх значення вказують на доцільність впровадження розробленої нами методики. Отже, результати

Групи	Рівні	Емпіричний	Теоритичний	$(E - T)^2 / T$
Контрольна	Низький	6	4,46	0,53
	Середній	81	67,41	2,74
	Достатній	60	63,94	0,24
	Високий	25	36,18	3,46
Експериментальна	Низький	3	4,54	0,52
	Середній	55	68,59	2,69
	Достатній	69	65,06	0,24
	Високий	48	36,82	3,40
χ^2				13,82

Рис. 2. Зведена таблиця розрахунку критерію Пірсона

№	Контрольна група	Експериментальна група	Оцінки груп	Ранг	Результат	
1	4	10	3	5	n1	172
2	10	5	3	5	R1	25908
3	6	8	3	5	n2	175
4	5	9	3	5	R2	34470
5	4	7	3	5	Uемп	11030
6	5	8	3	5		
7	10	8	3	5		
8	11	10	3	5		
9	4	5	3	5		

Рис. 3. Зведена таблиця розрахунку критерію Манна-Уїтні

педагогічного експерименту дають підстави для висновку, що запропонована нами методика вивчення фізики на основі білінгвального під-

ходу є ефективною та може рекомендуватися до впровадження у практику навчання фізики у закладах загальної середньої освіти.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Вергун І. В. Визначення рівня володіння компетентністю спілкування іноземними мовами для ефективного впровадження білінгвального підходу навчання фізики. *Наукові записки. Серія: Педагогічні науки*, 2019. 177(1). С. 87-93.
2. Вергун І. В. Методика навчання фізики старшокласників в умовах відкритого білінгвально-орієнтованого освітнього середовища. *Наукові записки. Серія: Педагогічні науки*, 2019. № 183, С. 180-184.
3. Вергун І. В. Методика навчання наскрізних понять з фізики на основі білінгвального підходу. *Наукові записки. Серія: Педагогічні науки*, 2020, (191), 227-230.
4. Вергун І.В., Трифонова О. М., *Задачі з фізики & Problems of physics: навчально-методичний посібник*. Кропивницький: ПП «Ексклюзив-Систем», 2021. 188 с.
5. Вергун І.В., Трифонова О. М., *Фізична лабораторія & Physical laboratory*. Кропивницький: ПП «Ексклюзив-Систем», 2020. 103 с.
6. Гончаренко С. У. Педагогічні дослідження: методологічні поради молодим науковцям / С. У. Гончаренко. – КиївВінниця : Вінниця, 2008. – 278 с.
7. Дробін А.А. Формування фізичних понять у школярів на основі статистичного та імовірнісного підходів: дис. ... канд. пед. наук : 13.00.02; Кіровоград. держ. пед. ун-т ім. ВолодимираВинниченка. Кіровоград, 2012. 325 с.
8. Мартинюк М. Т. Науково-методичні засади навчання фізики в основній школі: автореф. дис. д-ра пед. наук: 13.00.02.Київ, 1999. 34 с
9. Навчальні програми для 10-11 класів закладів загальної середньої освіти: Фізика і Астрономія. 10-11 класи (наказ № 1539 від 24.11. 2017 р.). К.: Освіта, 2017. 55 с. URL: <https://mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/programy-10-11-klas/2018-2019/fizika-i-astronomiya-10-11-avtorskij-kolektiv-pid-kerivnicztvom-lyashenka-o-i.doc>.
10. Навчальні програми для 7-9 класів закладів загальної середньої освіти: Фізика. 7-9 класи (наказ № 804 від 07.06.2017 р.). К.: Освіта, 2017. 40 с. URL: <https://mon.gov.ua/storage/app/media/zagalna%20serednya/programy-5-9-klas/onovlennya-12-2017/7-fizika.doc>.

11. Садовий М. І. Теоретичні та методичні основи становлення та розвитку фундаментальних ідей дискретності та неперервності в курсі фізики загальноосвітньої школи : автореф. дис... д-ра пед. наук : 13.00.02. Київ., 2001. 37 с.
12. Садовий М. І. Особливості педагогічного експерименту у дисертаційних дослідженнях / М. І. Садовий // *Наукові записки*. – Серія: Педагогічні науки. – Кіровоград: РВВ КДПУ ім. В. Винниченка, 2012. – Вип. 106. – С. 110-121.
13. Садовий М. І. Трифонова О. М., Стадніченко С. М. Формування сучасної наукової картини світу засобами системи наскрізних понять. *Наукові записки. Педагогічні науки*. Кіровоград, 2014. Вип. 132. С. 65–70.
14. Шкільні підручники. URL: <https://4book.org/uchebniki-ukraina> (дата звернення: 18.05.2020).

REFERENCES:

1. Verhun, I. V. (2019) Vyznachennia rivnia volodinnia kompetentnistiu spilkuvannia inozemnymy movamy dlia efektyvnoho vprovadzhennia bilinhvalnoho pidkhotu navchannia fizyky [Determining the level of proficiency in the competence of communication in foreign languages for the effective implementation of a bilingual approach to teaching physics]. *Naukovi zapysky. Seriya: Pedagogichni nauky*. 177(1), 87-93, [in Ukrainian].
2. Verhun, I. V. (2019). Metodyka navchannia fizyky starshoklasnykiv v umovakh vidkrytoho bilinhvalno-orientovanoho osvithnoho seredovysshcha [The method of teaching physics to high school students in the conditions of an open bilingual-oriented educational environment.]. *Naukovi zapysky. Seriya: Pedagogichni nauky*, 183, 180-184. [in Ukrainian].
3. Verhu, I. V. (2020). Methodology of teaching cross-cutting concepts in physics based on a bilingual approach [Methodology of teaching cross-cutting concepts in physics based on a bilingual approach]. *Naukovi zapysky. Seriya: Pedagogichni nauky*, 19, 227-230. [in Ukrainian].
4. Verhun I.V. & Tryfonova O. M., (2021). Zadachi z fizyky && Problems of physics: navchalno-metodychni posibnyk. [Problems of physics && Problems of physics: educational and methodological manual] Kropyvnytskyi: PP «Ekskliuzyv-System». [in Ukrainian].
5. Verhun I.V., & Tryfonova O. M., (2020). Fizychna laboratoriya && Physical laboratory.[Physical laboratory && Physical laboratory] Kropyvnytskyi: PP «Ekskliuzyv-System». [in Ukrainian].
6. Goncharenko S. U.(2008) Pedagogical research: methodological advice to young scientists [Pedagogical research: methodological advice to young scientists]. 278. [in Ukrainian].
7. Drobin A.A. (2012) Formuvannia fizychnykh poniat u shkolariv na osnovi statystychnoho ta imovirnisnoho pidkhotiv. [The formation of physical concepts among schoolchildren based on statistical and probabilistic approaches] 325. [in Ukrainian].
8. Martyniuk M. T. (1999) Naukovo-metodychni zasady navchannia fizyky v osnovnii shkoli [Scientific and methodological principles of teaching physics in primary school]. 34 . [in Ukrainian].
9. Navchalni prohramy dlia zahalnoosvitnikh navchalnykh zakladiv: Fizyka. 10-11 klasy (2017) [Educational programs for general educational institutions]. Kiev. . [in Ukrainian].
10. Navchalni prohramy dlia zahalnoosvitnikh navchalnykh zakladiv: Fizyka. 7-9 klasy (2017) [Educational programs for general educational institutions]. Kiev. . [in Ukrainian].
11. Sadoviy M. I. (2001) Teoretychni ta metodychni osnovy stanovlennia ta rozvytku fundamentalnykh idei dyskretnosti ta neperervnosti v kursy fizyky zahalnoosvitnoi shkoly [Theoretical and methodological foundations of the formation and development of the fundamental ideas of discreteness and continuity in the physics course of a general education school] 37. [in Ukrainian].
12. Sadoviy M. I. (2012) Peculiarities of the pedagogical experiment in dissertation studies.[Peculiarities of the pedagogical experiment in dissertation studies] *Naukovi zapysky. Seriya: Pedagogichni nauky*, (106), 110-121. [in Ukrainian].
13. Sadoviy M. I. & Tryfonova O. M & Stadnichenko S. M (2014) Formuvannia suchasnoi naukovo kartyny svitu zasobamy systemy naskriznykh poniat [Formation of the modern scientific picture of the world by means of a system of cross-cutting concepts]. 65–70. [in Ukrainian].
14. Shkilni pidruchnyky. [School textbooks] (n.d.). 4book.org Retrieved from <https://4book.org/uchebniki-ukraina> [in Ukrainian]. (data zvernennia: 18.05.2020).

УДК 621.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-2>**Оксана ЗАМУРУЄВА**

кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Україна, 43025

Scopus Author ID: 56181742100

Бібліографічний опис статті: Замуруєва, О., (2022) Властивості халькогенідних напівпровідників групи $A^I B^{III} C_2^{VI}$ *Фізика та освітні технології*, 2, 9–15, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-2>

ВЛАСТИВОСТІ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ ГРУПИ $A^I B^{III} C_2^{VI}$

Показано, якщо на один аніон алмазоподібних і похідних від них структур припадає одна октаедрична та дві тетраедричні пустоти, коли катіони мають заповнювати половину тетраедричних пустот, це означає, що на формульну одиницю $Ag_2In_2SiSe_6$ для утворення бездефектної моделі потрібно шість катіонів. Для іонів Ag^+ у халькопіритній структурі відводиться 25 % усіх пустот (1/4 частину). У структурі $Ag_2In_2SiSe_6$ срібло заповнює 16,7 % (1/6 частину) загальної кількості тетраедричних пустот. При переході $AgInSe_2$ до $Ag_2In_2SiSe_6$ індій замінюється германієм, тому загальна кількість заповнених тетраедрів (In, Si) Se_4 на комірку залишається незмінною, а позиції Аргентуму стають дефектними.

При порівнянні на основі єдиної енергетичної шкали рентгенівських емісійних смуг $Se K\beta_2$ і рентгенівських фотоелектронних спектрів валентної зони кристалів показано, що значний внесок до верхньої частини валентної зони здійснюють $Se 4p$ -стани. Визначено енергії зв'язку основних електронів складових елементів неопромінених й опромінених іонами Ar^+ поверхонь кристалів. Спостерігаємо деяку чутливість до бомбардування їх іонами Ar^+ з енергією 3,0 кеВ упродовж 5 хв. Вміст атомів індію (In) в шарах збільшився в 1,4 – 1,5 рази, атомів селену (Se) – не змінився.

Оцінено ефективну масу електронів і дірок із застосуванням потенціалу DFT/PBE для різних структур у двох взаємоперпендикулярних напрямках. Відношення обчисленої ефективної маси електронів до вільного електрона становить 0,1449.

Оцінено ширину забороненої зони при різних температурах, значення E_g для сполуки $Ag_2In_2SiSe_6$ становлять 1,76 еВ (100 К) та 1,68 еВ (300 К). У роботі встановлено, що кристали $Ag_2In_2SiSe_6$ прямозонні напівпровідники. Виконання правила Урбаха й велике значення E_U засвідчує, що кристали належать до дефектних напівпровідників, які за своєю електронною структурою наближаються до неупорядкованих систем.

Ключові слова: основні рівні, енергія активації, прямо зонні напівпровідники, правило Урбаха.

Оксана ZAMURUEVA

Candidate of 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, Ukraine, 43025

Scopus Author ID: 56181742100

To cite this article: Zamurueva, O. (2022) Vlastyvosti halkogenidnyh napivprovodnykiv grupi $A^I B^{III} C_2^{VI}$ (Properties of chalcogenide semiconductors of the group $A^I B^{III} C_2^{VI}$) *Physics and educational technology*, 2, 9–15, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-2>

PROPERTIES OF CHALCOGENIDE SEMICONDUCTORS OF GROUP $A^I B^{III} C_2^{VI}$

It is shown that if one anion of diamond-like structures and structures derived from them has one octahedral and two tetrahedral voids, when cations must fill half of the tetrahedral voids, this means that six cations are required per $Ag_2In_2SiSe_6$ formula unit to form a defect-free model. For Ag^+ ions in the chalcopyrite structure, 25% of all voids (1/4 part) are allocated. In the $Ag_2In_2SiSe_6$ structure, argentine fills 16.7% (1/6th) of the total number of tetrahedral voids. In the transition from $AgInSe_2$ to $Ag_2In_2SiSe_6$, indium is replaced by germanium, so the total number of filled (In, Si) Se_4 tetrahedra per cell remains unchanged, and Argentine positions become defective.

A comparison based on a single energy scale of the X-ray emission bands of $Se K\beta_2$ and the X-ray photoelectron spectra of the valence band of crystals shows that a significant contribution to the upper part of the valence band is made by $Se 4p$ states. The binding energies of core electrons of the constituent elements of non-irradiated and Ar^+ ion-irradiated crystal

surfaces were determined. We observe some sensitivity to their bombardment with Ar^+ ions with an energy of 3.0 keV for 5 min. The content of indium atoms (In) in the layers increased by 1.4-1.5 times, selenium atoms (Se) did not change.

The effective mass of electrons and holes was estimated using the DFT/PBE potential for various structures in two mutually perpendicular directions. The ratio of the calculated effective mass of electrons to the free electron is 0.1449.

The band gap at different temperatures was evaluated, the values E_g for the compound $Ag_2In_2SiSe_6$ are 1.76 eV (100K) and 1.68 eV (300K). The work established that $Ag_2In_2SiSe_6$ crystals are direct-band semiconductors. The fulfillment of Urbach's rule and its great significance proves that the crystals belong to defective semiconductors, which in terms of their electronic structure are close to disordered systems.

Key words: core levels, activation energy, direct bandgap semiconductors, Urbach's rule.

Вступ. В сучасному світі у різних галузях оптоелектронної техніки широко застосовують комплексні халькогеніди срібла (Khyzhun, 1996). Деякі з цих халькогенів використовують як фотоелементи, вузькосмугові оптичні фільтри (Lazarev, 1993), і тощо. Багато представників цієї групи має нецентросиметричну структуру (Khyzhun, 1996) й перспективні для нелінійної оптики.

Сполуки із загальною формулою $AgB^III X_2$ (B^III – Ga, In; X – S, Se, Te) кристалізуються в структурі халькопїриту і є електронно-хімічними аналогами бінарних сполук $A^IV B^VI$ (Lazarev, 1993). Найбільш широко застосовуються сьогодні, знайшли $AgGaS_2$ і $AgGaSe_2$ – одні з кращих нелінійних оптичних матеріалів для ближньої ІЧ-області спектра електромагнітного випромінювання (Olekseyuk, 1996). Додавання дихалькогенів германію до вказаних вище кристалів приводить до утворення сполук $AgGaGeS_4$ (Halyan, 2009) й $AgGaGe_3Se_8$ (Badikov, 1991), що кристалізуються в орторомбічній структурі й мають кращі нелінійно-оптичні властивості порівняно з потрійними сполуками. Вплив інших дихалькогенів, зокрема дихалькогену кремнію на сполуки типу $AgB^III X_2$ недостатньо вивчений. Тетрарні кристали $Ag_2In_2SiSe_6$ мають потенційне застосування в інфрачервоній оптоелектроніці, квантовій електроніці, світловипромінювальних діодах і сонячних системах як перспективні вузькосмугові напівпровідникові матеріали (Zhang, 2012).

Мета роботи. Дослідити властивості халькогенідних напівпровідників групи $A^IV B^III C_2^{VI}$, а саме $Ag_2In_2SiSe_6$.

Методика та техніка експерименту. Халькогенідні сполуки вирощувались за методом Бріджмена-Стокбаргера. В результаті були отримані монокристали, розміри яких придатні для фізичних досліджень.

Для вивчення структурних, електронних, оптичних параметрів досліджуваних кристалів використано теорію функціоналу щільності (DFT) із відбором двох різних потенціалів.

Для вимірювання енергії зв'язку остовних рівнів електронів атомів використано метод рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (РФ), а також для запису РФ-спектрів валентних електронів. Як спектрограф використовувався монохроматор МДР – 208 з комп'ютерною системою управління і обробкою результатів експерименту. При дослідженні спектрів поглинання світла використовувався кремнієвий фотоприймач.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. Насамперед у роботі (Makowska-Janusik, 2014) оптимізовано геометрію обох досліджуваних структур. Розмір елементарної комірки й симетрія структури збережені під час процедури оптимізації геометрії. Схема Бройдена – Флетчера – Гольдфарба – Шанно (BFGS) використана як алгоритм мінімізації. Обрано такі конвергенційні параметри оптимізації: енергія, що дорівнює 2×10^{-5} еВ/атом; сила, що діє на атом, менша за 0,01 еВ/Å, тиск, що діє на атом, менший, за 0,02 ГПа, максимальне атомне зміщення дорівнює 5×10^{-4} Å.

Електронну обмінно-кореляційну енергію враховували в межах узагальненої градієнтної апроксимації (GGA), використовуючи потенціал Пердю – Бурке – Ернцхофа (PBE). Щоб виконати розрахунки з найменшою можливою граничною енергією для базису плоских хвиль, в обчисленнях потрібно використовувати псевдопотенціали, які зберігають норму. Псевдоатомні обчислення виконані для Ag 4s2 4p6 4d10 5s1, In 5s2 5p1, Si 3s2 3p2, Se 4s2 4p4. Гранична енергія базису плоских хвиль дорівнює 650 еВ. Інтегрування за відібраними особливими точками по зоні Бріллюєна здійснювали за допомогою методу Монкхорста – Пака, застосовуючи спеціальну К-точкову сітку розміром $3 \times 5 \times 3$. Повну енергію вважають конвергованою, коли допустиме відхилення самоузгодженого поля (SCF) становить 10^{-5} еВ/атом. Обчислення елементарної комірки, виконані

для обох систем, створені елементарні комірки представлені на рис. 1.

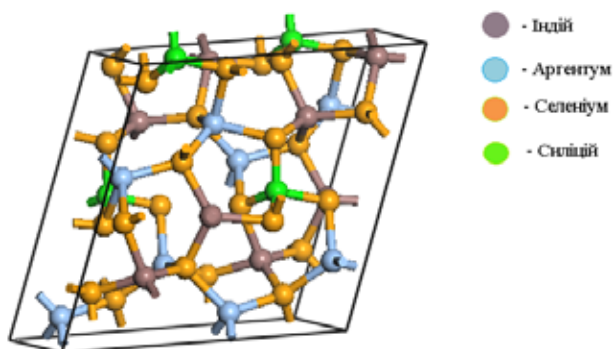


Рис. 1. Елементарна комірка $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$

У структурі знайденої сполуки можна чітко виділити аніонну підрешітку Селену, тетраедричні пустоти якої частково заповнені катіонами аргентуму, германію та індію. Порядок розміщення катіонів у тетраедричних пустотах вибрано відповідно до розмірів пустот й іонних радіусів металів. У структурі досліджуваної сполуки існує три види таких пустот: найбільші – радіусом 0,073 – 0,074 нм; середні – 0,062 нм; найменші – 0,034 нм. Ці розміри усереднені для кожної з пустот, оскільки майже всі координаційні многогранники катіонів деформовані. Можна також оцінити радіуси пустот із найкоротших міжатомних віддалей Se-Se, вважаючи, що аніони утворюють жорсткі тетраедри. Отож, аргентум має заповнювати пустоти з найбільшим, індій – із середнім, германій – із найменшим радіусом.

Отже, якщо на один аніон алмазоподібних і похідних від них структур припадає одна октаедрична та дві тетраедричні пустоти, коли катіони мають заповнювати половину тетраедричних пустот, це означає, що на формульну одиницю $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ для утворення бездефектної моделі потрібно шість катіонів. Для іонів Ag^+ у халькопіритній структурі відводиться 25 % усіх пустот (1/4 частину). У структурі $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ аргентум заповнює 16,7 % (1/6 частину) загальної кількості тетраедричних пустот. При переході AgInSe_2 до $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ індій заміщується германієм, тому загальна кількість заповнених тетраедрів (In, Si) Se_4 на комірку залишається незмінною, а позиції Аргентуму стають дефектними. Унаслідок відсутності одного із шести всіх необхідних на формульну одиницю катіонів різко змінюється

тетрагональна симетрія структури на низькосиметричну моноклінну.

На сьогодні фізико-хімічні властивості сполук $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ недостатньо вивчені. У літературі немає даних про експериментальні вимірювання й «першопринципні» розрахунки електронної структури селенідів $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$. У багатьох експериментальних дослідженнях та «першопринципних» розрахунках зонної структури бінарних, тернарних і тетрарних ді- й тетрасульфідів (селенідів) було встановлено, що їх електронні структури визначаються значними внесками валентних S (Se) p-станів по всій області валентної зони (Khyzhun, 2014).

Рентгенівські емісійні Se $K\beta_2$ -смуги досліджуваних селенідів $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ суміщено в єдиній енергетичній шкалі з їх рентгенівськими фотоелектронними спектрами валентних електронів. У межах досліджень розглядаємо вплив опромінення іонами Ar^+ , як метод очищення поверхні, що широко застосовують в епітаксійних технологіях (Hüfner, 2013).

Оглядові рентгенівські фотоелектронні спектри неопромінених й опромінених іонами Ar^+ поверхонь кристалів $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ (Hüfner, 2013) наведено на рис. 2. Очевидно, що всі спектральні характеристики, за винятком 1s рівнів та Оже-ліній вуглецю та кисню, належать до остовних рівнів або Оже-ліній складових елементів. Коли поверхні піддаються впливу повітря впродовж порівняно тривалого часу (кілька тижнів), жодної активної хімічної взаємодії з киснем не спостерігається. Відносні інтенсивності ліній O1s досить невеликі (рис. 2) на досліджуваних неопромінених поверхнях кристалів, при чому не виявлено будь-яких слідів присутності кисню після бомбардування іонами Ar^+ поверхонь $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$. Отримані РФС-дані вказують на низьку гігроскопічність поверхонь кристалів, що важливе для використання таких матеріалів у пристроях, що працюють в умовах навколишнього середовища.

Значення енергії зв'язку остовних електронів складових елементів неопромінених й опромінених іонами Ar^+ поверхонь кристалів $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ наведено в табл. 1. Отримані результати показують деяку чутливість поверхонь кристалів до бомбардування їх іонами Ar^+ з енергією 3,0 кеВ упродовж 5 хв. Вміст атомів індію (In) в шарах збільшився в 1,4 – 1,5 рази, атомів селену (Se) – не змінився.

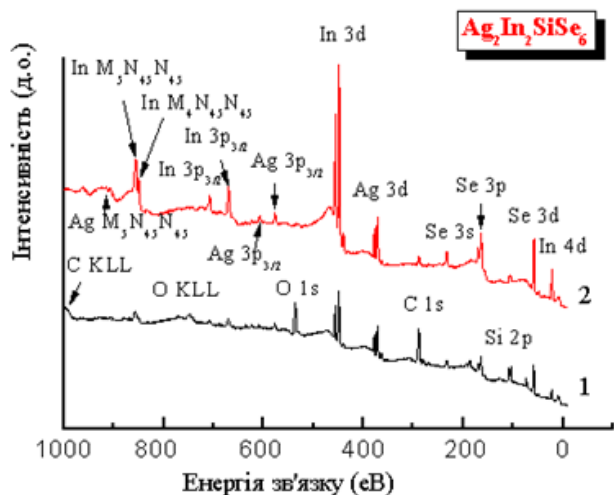


Рис. 2. Оглядові рентгенівські фотоелектронні спектри досліджуваних поверхонь кристалів $Ag_2In_2SiSe_6$ для: 1 – неопромінених; 2 – опромінених іонами Ar^+

Отже, така обробка не змінює значення енергій зв'язку основних електронів усіх атомів – складових елементів сполук $Ag_2In_2SiSe_6$, окрім індію (In). З даних, наведених у табл. 1, опромінення іонами Ar^+ поверхонь кристалів знижує значення енергій зв'язку основних In 3d та In 4d електронів приблизно на 0,2 еВ.

Таблиця 1
Енергії зв'язку (в еВ*) основних рівнів складових елементів необроблених та опромінених іонами Ar^+ поверхонь кристалів $Ag_2In_2SiSe_6$

Остовний рівень/валентна зона	$Ag_2In_2SiSe_6$ / необроблена поверхня	$Ag_2In_2SiSe_6$ / поверхня опромінена іонами Ar^+
максимум валентної зони	4,74	4,65
In 4d	17,56	17,34
Si 2p	100,67	100,58
Se 3p _{3/2}	159,79	159,75
Se 3p _{1/2}	165,51	165,55
Ag 3d _{5/2}	367,11	367,19
Ag 3d _{3/2}	373,18	373,15
In 3d _{5/2}	444,08	443,87
In 3d _{3/2}	451,72	451,46

* Похибка вимірювань $\pm 0,05$ еВ.

** Похибка вимірювань $\pm 0,1$ еВ.

Під час досліджень електронних властивостей і оптичних характеристик обчислено електронні зонні структури кристалів $Ag_2In_2SiSe_6$ із застосуванням потенціалів DFT/PBE і DFT/B3LYP.

Насамперед геометрії двох зазначених систем було оптимізовано, зберігаючи симетрію кристалів і параметрів ґратки, точкова група була визначена як C_c . Експериментально одержані міжатомні відстані та дані, що теоретично отримані після оптимізації геометрії, наведені в табл. 1.

Таблиця 2
Міжатомні відстані в кристалах

Ідентифікація зв'язку	Довжина зв'язку	
	$Ag_2In_2SiSe_6$	
	Експ [нм]	DFT/PBE [нм]
Ag1-Se1	0,2711	0,274496
Ag1-Se2	0,2648(8)	0,266620
Ag1-Se4	0,2745(15)	0,270416
Ag1-Se5	0,2671(14)	0,272499
Ag2-Se2	0,2690(14)	0,269275
Ag2-Se3	0,2799(11)	0,282534
Ag2-Se5	0,2652(15)	0,268887
Ag2-Se6	0,2693(10)	0,267130
In1-Se1	0,2654	0,254664
In1-Se2	0,2607(13)	0,254939
In1-Se5	0,2654(13)	0,254435
In1-Se6	0,2631(14)	0,254332
In2-Se2	0,2588(14)	0,255183
In2-Se3	0,2588(12)	0,254757
In2-Se4	0,2573(13)	0,252890
In2-Se5	0,2597(9)	0,253565
Si / Ge-Se1	0,2330	0,226638
Si / Ge-Se3	0,222(2)	0,225268
Si / Ge-Se4	0,227(3)	0,225843
Si / Ge-Se6	0,225(2)	0,228132

Обчислена дисперсія зонної структури – основа для розрахунку ефективних мас носіїв. Ефективну масу електронів (m_e^*) визначено (Makowska-Janusik, 2014) за кривизною в нижній частині зони провідності в k -просторі. Діагональні елементи тензора ефективної маси для електронів і дірок обчислено за рівнянням навколо Γ точки зони Брілюєна для зони провідності та валентної зони, відповідно:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \quad (1).$$

Ефективну масу електрона визначають через узгодження структури зони провідності з параболічною функцією.

Відношення обчисленої ефективної маси електронів до вільного електрона для кристалів $Ag_2In_2SiSe_6$ дорівнює 0,1449. Рухливість електронів у напрямку, паралельному до осей α елементарних комірок нижча, ніж у перпен-

дикулярному напрямку (див. табл. 3), підтверджуючи значну анізотропію. Варто наголосити, що отримані параметри оцінено без урахування електрон-фононої взаємодії, яка спричиняє розширення енергетичних зон й особливо сильна в халькогенідних сполуках.

Для експериментальної оцінки ширини забороненої зони проведено спектральне дослідження коефіцієнта пропускання й відбивання (Andreev, 2000). Коефіцієнт поглинання розраховано за зареєстрованими спектрами пропускання за формулою (2) (Makowska-Janusik, 2014):

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left\{ \frac{(1-R)^2}{2T} + \sqrt{\left[\frac{(1-R)^2}{2T} \right]^2 + R^2} \right\}, \quad (2)$$

На рис. 3. представлено залежності $(\alpha h\nu)^2$ від $h\nu$. Оскільки встановлено, що досліджувані сполуки – прямозонні напівпровідники, то ширину забороненої зони (E_g) оцінювали екстраполяцією прямолінійної ділянки залежності $(\alpha h\nu)^2$ від енергії фотона $h\nu$ до перетину з віссю абсцис.

Отримані нами значення E_g для сполуки $Ag_2In_2SiSe_6$ становлять 1,76 eV (100 K) та 1,68 eV (300 K). Зі збільшенням температури ширина забороненої зони зменшується (рис. 3), що може бути зумовлено: а) взаємним відштовхуванням рівнів у зонах при збільшенні електрон-фононої взаємодії; б) тепловим розширенням решітки (ангармонізм коливань) і відповідною залежністю енергетичної щільності від сталої решітки; в) згладжуванням періодичного потенціалу, що описується фактором Дебая-Уоллера; г) взаємодією міжзонних станів.

Найбільший вклад у зміну ширини забороненої зони вносять перших два механізми. Розраховані температурні коефіцієнти зміни ширини забороненої зони ($\frac{\partial E_g}{\partial T}$) становлять $-0,35 \cdot 10^{-3}$

eV/K. Як видно з отриманих результатів, температурні коефіцієнти має негативний знак, а це дає змогу припустити, що внесок електрон-фононої взаємодії при збільшенні температури більший, ніж внесок від теплового розширення решітки.

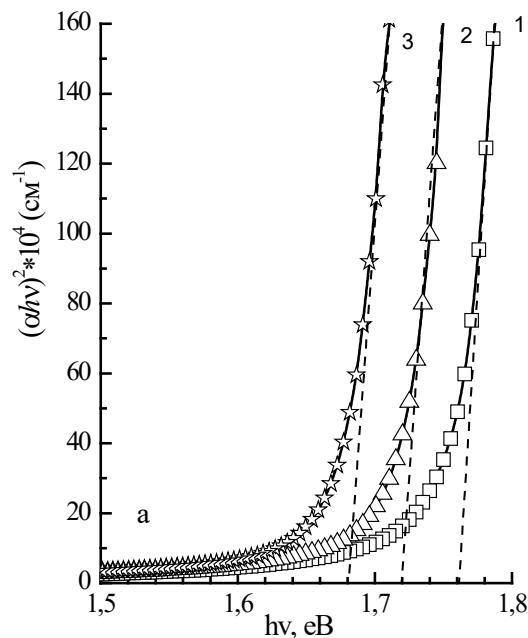


Рис. 3. Енергетична залежність коефіцієнта поглинання світла $\alpha = \alpha(h\nu)$ для кристалів $Ag_2In_2SiSe_6$ за різних температур T , К: 1 – 100; 2 – 200; 3 – 300

Нижче області сильного поглинання слідує експоненційна залежність α від $h\nu$ («хвіст» Урбаха) (Urbach, 1953). Для пояснення такої експоненційної залежності було запропоновано декілька механізмів: варіації ширини забороненої зони зумовлені флуктуаціями густини, а також розширення краю зони, яке індуковане внутрішніми електричними полями. У роботі (Meisel, 1989) висунуто припущення, що край

Таблиця 3

Ефективна маса електронів і дірок, обчислена при застосуванні потенціалу DFT/PBE для різних структур у двох взаємноперпендикулярних напрямках

Структура	Ефективна маса електронів		Ефективна маса дірок	
	$m_e^* \parallel \alpha$	$m_e^* \perp \alpha$	$m_h^* \parallel \alpha$	$m_h^* \perp \alpha$
$Ag_2In_2SiSe_6$	0,1944 m_e	0,1449 m_e	0,5372 m_e	0,4015 m_e
$Ag_2In_2SiSe_6 + Se_6$	0,2014 m_e	0,5008 m_e	2,0568 m_e	0,5045 m_e
$Ag_2In_2SiSe_6 + Ag$	0,7007 m_e	0,1899 m_e	3,2632 m_e	2,2294 m_e

поглинання відображає появу густини станів унаслідок флуктуації кутів і довжин зв'язків.

У досліджуваних зразках на експоненційній ділянці залежність α від $h\nu$ підпорядковується правилу Урбаха:

$$\alpha = \alpha_0 \exp(E - E_0 / E_U), \quad (3)$$

Форма краю поглинання, яка описана емпіричним правилом Урбаха, добре виконується для багатьох кристалічних й аморфних сполук (Meisel, 1989). Для кристалічних напівпровідників за низьких температур $T < T_0$ (де T_0 – характеристична температура) величина E_U не залежить від T , але залежить від концентрації дефектів. За $T > T_0$ E_U залежить від температури за законом: $E_U = cT$, де c – константа.

Для аморфних напівпровідників T_0 значно більше, ніж для кристалічних речовин, які підпорядковані правилу Урбаха. Для більшості з них T_0 лежить вище температури розм'якшення, тому можна вважати, що E_U для аморфних сполук не залежить від температури.

Виконання правила Урбаха й велике значення E_U засвідчує, що кристали $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$

належать до дефектних напівпровідників, які за своєю електронною структурою наближаються до неупорядкованих систем. Водночас, оскільки речовини – складні фази, вони багаті структурними дефектами і домішкового, і технологічного походження, які утворюють енергетичні рівні в забороненій зоні напівпровідника. Тому слід сподіватися, що спектр електронних станів у досліджуваних сплавах подібний до таких, як у сильнодефектних неупорядкованих або аморфних напівпровідниках.

Висновки. За розрахунками зонної структури встановлено, що кристали $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ прямозонні напівпровідники. Порівняння на основі єдиної енергетичної шкали рентгенівських емісійних смуг $\text{Se K}\beta_2$ і рентгенівських фотоелектронних спектрів валентної зони кристалів дає підстави зробити висновок, що значний внесок до верхньої частини валентної зони здійснюють $\text{Se } 4p$ -стани. Оцінено ширину забороненої зони за $T=100$ К і $T=300$ К. Обчислений термічний коефіцієнт зміни ширини забороненої зони для інтервалу 100 – 300К становить $3,5 \cdot 10^{-4}$ і $4,0 \cdot 10^{-4}$ eВ/К.

ЛІТЕРАТУРА:

1. O. Y. Khyzhun, Y. V. Zaulychny, E. A. Zhurakovsky Electronic Structure of Tungsten and Molybdenum Germanides Synthesized at High Pressures *J. Alloys Compd.* 1996. Vol. 244, № 1–2. P. 107–112.
2. V. B. Lazarev, Z. Z. Kish, E. Yu. Peresh, E. E. Semrad. Complex Chalcogenides in $A_{\text{I}}-B_{\text{III}}-C_{\text{VI}}$ Systems *Moscow : Metallurgiya.* 1993. 240 p.
3. I. D. Olekseyuk, A. V. Gulyak, L. V. Sysa [et al.] Crystal Chemical Properties and Preparation of Single Crystals of $\text{AgGaSe}_2-\text{GeSe}_2$ γ -solid Solutions *J. Alloys Compd.* 1996. Vol. 241. № 1–2. P. 187–190.
4. V. V. Halyan, M. V. Shevchuk, G. Ye. Davydyuk [et al.] Glass formation region and X-ray analysis of the glassy alloys in $\text{AgGaSe}_2+\text{GeSe}_2 \rightleftharpoons \text{AgGaS}_2+\text{GeSe}_2$ system *Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron.* 2009. Vol. 12, № 2. P. 138–142.
5. V. V. Badikov, A. G. Tyulyupa, G. S. Shevyrdyaeva, S. G. Sheina Solid Solu in the $\text{AgGaS}_2-\text{GeSe}_2$ and $\text{AgGaSe}_2-\text{GeSe}_2$ System *Inorg. Mater.* 1991. Vol. 27, № 2. P. 177–180.
6. Y. Zhang, X. Sun, P. Zhang [et al.] Structural Properties and Quasiparticle Band Structures of Cu-based Quaternary Semiconductors for Photovoltaic Applications *J. Appl. Phys.* 2012. Vol. 111, № 6. P. 063709-6.
7. M. Makowska-Janusik, I. V. Kityk, G. Myronchuk [et al.] Manifestation of Intrinsic Defects in the Band Structures of Quaternary Chalcogenide $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ and $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{GeSe}_6$ Crystals *Cryst. Eng. Commun.* 2014. Vol. 16, № 40. P. 9534–9544.
8. O. Y. Khyzhun, G. L. Myronchuk, O. V. Zamurueva, O. V. Parasyuk Electronic Structure and Photoelectrical Properties of $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{SiSe}_6$ and $\text{Ag}_2\text{In}_2\text{GeSe}_6$ *Opt. Mater.* 2014. Vol. 38. P. 10–16.
9. S. Hüfner, Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications, Springer Science & Business Media, 2013.
10. Yu. Andreev, P. Geiko, V. Voevodin, A. Gusamov Optical Properties of $\text{AgGa}_x\text{In}_{1-x}\text{Se}_2$ Crystals *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000. Vol. 39, № S1. P. 94–95.
11. Urbach F. The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids *Phys. Rev.* 1953. Vol. 92, № 5. P. 1324.
12. A. Meisel, G. Leonhardt, R. Szargan, X-Ray Spectra and Chemical Binding New York: Springer-Verlag, 1989.

REFERENCES:

1. O. Y. Khyzhun, Y. V. Zaulychny, E. A. Zhurakovsky Electronic Structure of Tungsten and Molybdenum Germanides Synthesized at High Pressures *J. Alloys Compd.* 1996. Vol. 244, № 1–2. P. 107–112.

2. V. B. Lazarev, Z. Z. Kish, E. Yu. Peresh, E. E. Semrad. Complex Chalcogenides in A_I-B_{III}-C_{VI} Systems *Moscow : Metallurgiya*. 1993. 240 p.
3. I. D. Olekseyuk, A. V. Gulyak, L. V. Sysa [et al.] Crystal Chemical Properties and Preparation of Single Crystals of AgGaSe₂-GeSe₂ γ -solid Solutions *J. Alloys Compd.* 1996. Vol. 241. № 1–2. P. 187–190.
4. V. V. Halyan, M. V. Shevchuk, G. Ye. Davydyuk [et al.] Glass formation region and X-ray analysis of the glassy alloys in AgGaSe₂+GeSe₂ \leftrightarrow AgGaS₂+GeSe₂ system *Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron.* 2009. Vol. 12, № 2. P. 138–142.
5. V. V. Badikov, A. G. Tyulyupa, G. S. Shevyrdyaeva, S. G. Sheina Solid Solu in the AgGaS₂-GeSe₂ and AgGaSe₂-GeSe₂ System *Inorg. Mater.* 1991. Vol. 27, № 2. P. 177–180.
6. Y. Zhang, X. Sun, P. Zhang [et al.] Structural Properties and Quasiparticle Band Structures of Cu-based Quaternary Semiconductors for Photovoltaic Applications *J. Appl. Phys.* 2012. Vol. 111, № 6. P. 063709-6.
7. M. Makowska-Janusik, I. V. Kityk, G. Myronchuk [et al.] Manifestation of Intrinsic Defects in the Band Structures of Quaternary Chalcogenide Ag₂In₂SiSe₆ and Ag₂In₂GeSe₆ Crystals *Cryst. Eng. Commun.* 2014. Vol. 16, № 40. P. 9534–9544.
8. O. Y. Khyzhun, G. L. Myronchuk, O. V. Zamurueva, O. V. Parasyuk Electronic Structure and Photoelectrical Properties of Ag₂In₂SiSe₆ and Ag₂In₂GeSe₆ *Opt. Mater.* 2014. Vol. 38. P. 10–16.
9. S. Hüfner, Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications, Springer Science & Business Media, 2013.
10. Yu. Andreev, P. Geiko, V. Voevodin, A. Gusamov Optical Properties of AgGa_xIn_{1-x}Se₂ Crystals *Jpn. J. Appl. Phys.* 2000. Vol. 39, № S1. P. 94–95.
11. Urbach F. The Long-Wavelength Edge of Photographic Sensitivity and of the Electronic Absorption of Solids *Phys. Rev.* 1953. Vol. 92, № 5. P. 1324.
12. A. Meisel, G. Leonhardt, R. Szargan, X-Ray Spectra and Chemical Binding New York: Springer-Verlag, 1989.

UDC 546.711.49

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-3>

Andrey ZINOVCHUK

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of Physics and Methods of its Teaching, Zhytomyr Ivan Franko State University, 40 Velyka Berdychivska Str, Zhytomyr, Ukraine, 10008

ORCID ID: 0000-0003-1376-853X

SCOPUS-AUTHOR ID: 12140755600

Dmitrij STEPANCHIKOV

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Physics and Methods of its Teaching, Zhytomyr Ivan Franko State University, 40 Velyka Berdychivska Str, Zhytomyr, Ukraine, 10008

ORCID ID: 0000-0003-2460-512X

SCOPUS-AUTHOR ID: 6507869772

Regina VASILEVA

Candidate of Pedagogical Sciences, Associate Professor of the Department of Physics and Methods of its Teaching, Zhytomyr Ivan Franko State University, 40 Velyka Berdychivska Str, Zhytomyr, Ukraine, 10008

ORCID ID: 0000-0002-8190-0048

To cite this article: Zinovchuk, A., Stepanchikov, D., Vasileva, R. (2022). Faktor idealnosti v svitlodiodakh na osnovi InGaN/GaN kvantovykh yam z neodnorodnym roztykanniam strumu [Ideality factor in InGaN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes with nonuniform current spreading]. *Physics and educational technology*, 2, 16–22, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-3>

IDEALITY FACTOR IN INGAN/GAN MULTIPLE QUANTUM WELL LIGHT-EMITTING DIODES WITH NONUNIFORM CURRENT SPREADING

In this research we demonstrate that a high p-n junction ideality factor (β) in multiple quantum well InGaN-based light-emitting diodes grown on sapphire substrate may be connected to the current crowding effect. This effect is due to the localization of the current flow routes in some regions of a multilayer LED structure whose position are difficult to predict a priori. In lateral structures the current crowding forms regions of high current density in the vicinity of the contacts, resulting in a reduction of the effectively emitting area and the local overheating of the emitting structure. Numerous efforts have been made to identify the effect of the current crowding on the InGaN-based light-emitting diodes performance. Following this tendency, we show that high nonuniformity of current flow can lead to the increasing of the “apparent” ideality factor. This result shows that the ideality factor is not uniquely determined by carrier recombination and transport mechanism in the space charge region as it is predicted by classical one-dimensional theory of p-n junction. The experimental investigation of InGaN blue ($\lambda=460$ nm) light-emitting diodes with two different contact geometries confirm that the ideality factor increase from 2.2 (current spreading geometry) up to 3.6 (current crowding geometry). These findings reveal that the ideality factor obtained from I-V measurements in light-emitting diodes employing lateral injection can not be considered as a pure internal parameter of the p-n junction. This the current crowding affected modification of the ideality factor occurs mostly in the intermediate range of current where the space charge region dominates in the light-emitting diodes performance and erroneously could be treated as the change of carrier transport mechanism and carrier recombination nature.

Key words: InGaN, light-emitting diodes, ideality factor, current crowding.

Андрій ЗІНОВЧУК

кандидат фізико-математичних наук, завідувач кафедри фізики та методики її навчання, Житомирський державний університет імені Івана Франка, вул. Велика Бердичівська 40, м. Житомир, Україна, 10008

ORCID ID: 0000-0003-1376-853X

SCOPUS-AUTHOR ID: 12140755600

Дмитро СТЕПАНЧИКОВ

кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики та методики її навчання, Житомирський державний університет імені Івана Франка, вул. Велика Бердичівська 40, м. Житомир, Україна, 10008

ORCID ID: 0000-0003-2460-512X

SCOPUS-AUTHOR ID: 6507869772

Регіна ВАСИЛЬЄВА

кандидат педагогічних наук, доцент кафедри фізики та методики її навчання, Житомирський державний університет імені Івана Франка, вул. Велика Бердичівська 40, м. Житомир, Україна, 10008

ORCID ID: 0000-0002-8190-0048

Бібліографічний опис статті: Зіновчук, А., Степанчиков, Д., Васильєва, Р. (2022). Фактор ідеальності в світлодіодах на основі InGaN/GaN квантових ям з неоднорідним розтіканням струму. *Фізика та освітні технології*, 2, 16–22, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-3>

**ФАКТОР ІДЕАЛЬНОСТІ В СВІТЛОДІОДАХ НА ОСНОВІ INGAN/GAN
КВАНТОВИХ ЯМ З НЕОДНОРІДНИМ РОЗТІКАННЯМ СТРУМУ**

У цій роботі ми показуємо, що високе значення фактору ідеальності в світло діодах на основі InGaN, вирощених на сапфірових підкладках, може бути пов'язане з ефектом концентрування струму. Цей ефект виникає внаслідок локалізації ліній протікання струму в деяких областях світлодіодної структури, які важко передбачити а рiогi. В структурах з латеральною інжекцією ефект концентрування призводить до формування високої густини струму поблизу контактів, що викликає зменшення ефективно випромінюючої проці та локальний розігрів. Численні роботи були направлені та те, щоб з'ясувати вплив ефекту концентрування на ефективність роботи InGaN світлодіодів. Слідуючи цій тенденції, ми показали, що значна неоднорідність протікання струму може призводити до збільшення “видимого” фактору ідеальності. Такий результат доводить, що фактор ідеальності не визначається лише механізмами рекомбінації та транспорту носіїв заряду як це передбачається класичною теорією p-n переходу. Експериментальні дослідження InGaN (460 нм) світлодіодів з двома різними геометріями контактів доводять, що фактор ідеальності збільшується від 2,2 (геометрія з розтіканням струму) до 3,6 (геометрія концентрування струму). Ці висновки розкривають фактор ідеальності не як суто “внутрішній” параметр p-n переходу. Модифікація фактору ідеальності під дією ефекту концентрування трапляється, переважно, в проміжному інтервалі струмів, де область об’ємного заряду визначає ефективність роботи світлодіодів і може бути помилково трактована, як така, що виникає в результаті зміни механізмів транспорту і рекомбінації носіїв заряду.

Ключові слова: InGaN, світлодіод, фактор ідеальності, ефект концентрування струму.

Introduction

InGaN/GaN multiple quantum well (MQW) LEDs have attracted much attention because of their applications in general illuminations, back lighting and displays. Researches in this field have resulted in a great progress in the material quality, efficiency and lumen output of the nitride-based LEDs. Despite this, there are number of LED parameters which must be carefully determined for further improvement of the device performance. One of those parameters is the p-n junction ideality factor

(β). According to the classical Sah-Noyce-Shockley theory of the p-n junction under forward voltage, the current is dominated by the recombination of minority carriers in the neutral regions of the junction [1]. This results in the ideality factor equal to $\beta=1.0$. One of generalizations of the ideal p-n junction theory takes into account the recombination of carriers in the space charge region. In this case the ideality factor is equal to $\beta=2.0$. Both theories can not predict the ideality factors greater than 2.0. However it is well known that in MQW InGaN/

GaN LEDs grown on sapphire substrates β factor has anomalously high value $\beta \gg 2$. High ideality factor results in the increasing of the diode forward voltage and decreasing of the power conversion efficiency. To date, the reason of high β factor is not fully understood and explained. It is believed that β exceeding 2 in InGaN based p-n junctions originates from the trap-assisted tunneling [2, 3], carrier leakage inside the active MQW LED region [4], spontaneous and piezoelectric polarization in the quantum barriers [5] or is due to additional junctions available in the LED circuit [6]. In this work we show that the reason of high ideality factor may be the current crowding effect (CC), which is well known in InGaN/GaN LEDs on sapphire substrate [7,8]. This effect is due to the localization of the current flow routes in some regions of a multilayer LED structure whose position are difficult to predict *a priori*. The numerical simulation and experimental testing of blue lateral LEDs with two different contact geometries indicates the increasing of the ideality factor in the devices with nonuniform current spreading. This the CC affected modification of the ideality factor occurs mostly in the intermediate range of current where the space charge region dominates in the LED performance and erroneously could be treated as the change of carrier transport mechanism and carrier recombination nature.

Experiment and simulation

The objects of our investigation are blue InGaN/GaN MQW LEDs ($\lambda=460$ nm) grown on sapphire substrate by the metal organic chemical vapor deposition. Two different electrode patterns are investigated: a conventional *p*-side up bar-shaped structure and *p*-side down flip-chip structure with a wide reflecting *p*-contact (Fig. 1). Both types of LEDs have the same internal structure consisting of an *n*-GaN layer, MQW active region (five QWs and barriers), AlGaIn electron blocking layer and *p*-GaN layer. Throughout this paper we refer to the first structure as the current crowding contact geometry and the second structure as the current spreading contact geometry. The measurements of the current-voltage (*I-V*) characteristics have been performed in a pulsed mode with 1% duty cycle and 200 Hz frequency. A small duty cycle was chosen in order to minimize the self-heating effect. The field electroluminescence patterns have been monitored with the optical microscope connected to the CCD camera.

For the numerical simulations of the LED electrical properties we have considered commonly

accepted parameters and LED dimensions: *n*-GaN layer ($d_n=2.5$ μm , $n=5 \times 10^{18}$ cm^{-3}), active layer with nonlinear *p-n* junction conductivity, *p*-GaN layer ($d_p=0.1$ μm , $p=5 \times 10^{17}$ cm^{-3}), 1×1 mm^2 area. The conductivity of the active layer was represented by using diode-like current-voltage dependence $I=I_0(\exp(eV_{a.l.}/\beta kT) - 1)$, where I_0 is the saturation current, $V_{a.l.}$ is the voltage drop across the active layer, β is *p-n* junction ideality factor, k is Boltzmann's constant and T is temperature. We suppose that $\beta=2$ (recombination process in the space charge region) [9] and the saturation current $I_0=1.5 \times 10^{-23}$ A. The contact resistance, unipolar and metal-GaN junction were not taken into account. It was assumed that the electric charges are localized in the space-charge region of the *p-n* junction, that the other regions of a structure are neutral and that the diffusion component of the current in these regions may be neglected. Therefore, the electric potential distribution follows from the Laplace equation $\vec{\nabla}(\sigma(x,y,z,V_{a.l.})\vec{\nabla}\varphi)=0$, while the local current density is connected to the potential gradient via the Ohm law $\vec{J} = -\sigma(x,y,z,V_{a.l.})\vec{\nabla}\varphi$ (where $\sigma(x,y,z,V_{a.l.})$ is the conductivities of the layers). The numerical simulations of the current flow have been performed in 3D mode with the finite element discretization scheme.

For the numerical simulations of the LED electrical properties we have considered commonly accepted parameters and LED dimensions: *n*-GaN layer ($d_n=2.5$ μm , $n=5 \times 10^{18}$ cm^{-3}), active layer with nonlinear *p-n* junction conductivity, *p*-GaN layer ($d_p=0.1$ μm , $p=5 \times 10^{17}$ cm^{-3}), 1×1 mm^2 area. The conductivity of the active layer was represented by using diode-like current-voltage dependence $I=I_0(\exp(eV_{a.l.}/\beta kT) - 1)$, where I_0 is the saturation current, $V_{a.l.}$ is the voltage drop across the active layer, β is *p-n* junction ideality factor, k is Boltzmann's constant and T is temperature. We suppose that $\beta=2$ (recombination process in the space charge region) [9] and the saturation current $I_0=1.5 \times 10^{-23}$ A. The contact resistance, unipolar and metal-GaN junction were not taken into account. It was assumed that the electric charges are localized in the space-charge region of the *p-n* junction, that the other regions of a structure are neutral and that the diffusion component of the current in these regions may be neglected. Therefore, the electric potential distribution follows from the Laplace equation $\vec{\nabla}(\sigma(x,y,z,V_{a.l.})\vec{\nabla}\varphi)=0$, while the local current density is connected to the potential gradient via the Ohm law $\vec{J} = -\sigma(x,y,z,V_{a.l.})\vec{\nabla}\varphi$

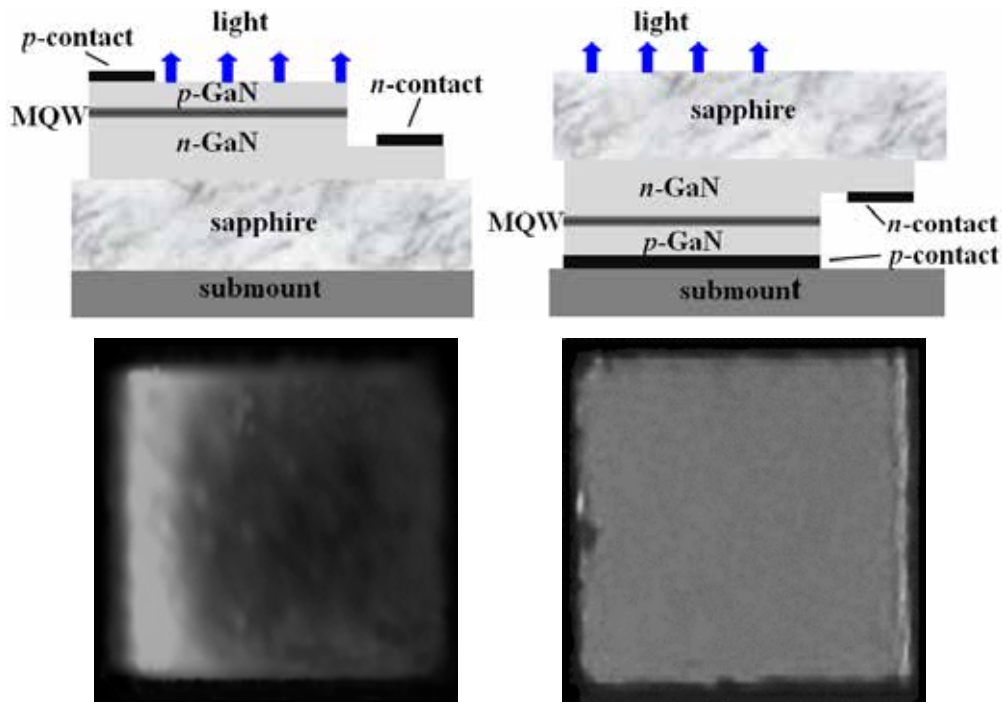


Fig. 1. Schematic representation of the InGaN/GaN LED structures under investigation and spatial distributions of the light emitted by the LEDs at $I=1$ mA: (left) p -side up structure (the current crowding contact geometry); (right) p -side down flip-chip structure (the current spreading contact geometry)

(where $\sigma(x,y,z,V_{a,l})$ is the conductivities of the layers). The numerical simulations of the current flow have been performed in 3D mode with the finite element discretization scheme.

Results and discussion

In Fig. 1 it is compared the spatial distribution of the light emitted at $I=5$ mA by both types of LEDs investigated in this paper. In case of the current spreading geometry whole emitting region emits almost uniformly, which indicates a good current spreading in the active layer. Alternatively, in case of the CC geometry the light spatial distribution becomes remarkably nonuniform even at very low injection levels ($I \approx 5$ mA). The experimental forward biased I - V characteristics and corresponding ideality factor versus current (β - I) dependences for two LED geometries are plotted in Fig. 2(a, b). Such I - V characteristics are typical for the lateral InGaN/GaN MQW LEDs [5, 9]. The high ideality factor in the low current range ($I < 10^{-4}$ A) are due to the shunt resistance (that is lower than the p - n junction resistance). The shunt resistance has been suggested to originate from the tunneling of carrier [10] and the surface carrier leakage [11]. In this range the ideality factor is almost identical for both geometries. At the

high currents ($I > 10^{-2}$ A), the ideality factor increases due to domination of the series resistance (R_s). The R_s value is the function of the lengths of the lateral current transport path in both p and n -GaN layers and thereby will be dependent on the CC. Due to relatively low doping level, low mobility of holes and small thickness of the p -GaN layer, this layer is suggested to be responsible for nonuniform current spreading across the LED structure and thus affects the series resistance. Indeed, in the p -side up structure the more pronounced CC makes the R_s value (determined via the linear fit from the I - V characteristic at the high injection levels) to increase ($R_s = 3.1 \Omega$) in comparison with the p -side down flip-chip structure ($R_s = 1.8 \Omega$). In the intermediate current range (10^{-4} A $< I < 10^{-2}$ A), where the space charge region dominates, I - V characteristic is approximated by the exponential function and the ideality factor reaches its minimum value. As we can see from Fig. 2, this minimum value depends on the LED geometry. In case of the current spreading geometry minimum β value is equal to 2.2 while in the CC geometry $\beta \approx 3.6$. Since both I - V characteristics in Fig. 2 refer to the same internal LED structure, this modification of the

ideality factor connects to the CC and can not be treated as the change of carrier transport mechanism in the space charge region.

To identify whether the CC affects on the ideality factor, the numerical simulation have been performed for both types of the LEDs. For the conventional p -side up structure we have performed the simulations with different widths of the p -contact from 50 to 900 μm . At $I=5\text{ mA}$ in the flip-chip LED the current spreads practically uniform over the whole active layer (the insert in Fig.2(c)). Contrary to that, in the conventional p -side up LED, the length of the lateral current path (determined as the distance from the beginning of the p -contact to the position where the current density reduces to 50% of the value under the contact) decreases to a value as low as $\approx 100\text{ }\mu\text{m}$. The smaller is the p -contact width, the smaller is the length of the lateral current path and thus the CC is stronger. In Fig. 2 (c, d) it is presented the simulated I - V and β - I characteristics for both types of LEDs. Inspection of these results yields that

the shorter is the p -contact width, the higher becomes the device series resistance (R_s) that dominates in the high current range. While very low in the flip-chip LED ($R_s = 0.3\text{ }\Omega$), this value increases by ~ 12 times in the conventional p -side up LED ($R_s = 3.5\text{ }\Omega$). At the low currents, when the CC is negligible, all characteristics almost coincide and $\beta \approx 2$ for both LEDs (the shunt resistance was not taken into account in the simulations). However, in the intermediate range the ideality factors are significantly different. Particularly, $\beta \approx 2.1$ for the current spreading geometry and $\beta \approx 4.0$ for the CC geometry. Despite the fact that the simulation was performed with identical internal parameters for all LEDs, the CC makes the “apparent” ideality factor to increase. This result shows that the ideality factor is not uniquely determined by carrier recombination and transport mechanism in the space charge region as it is predicted by classical one-dimensional theory of p - n junction.

To identify whether the CC affects on the ideality factor, the numerical simulation have been

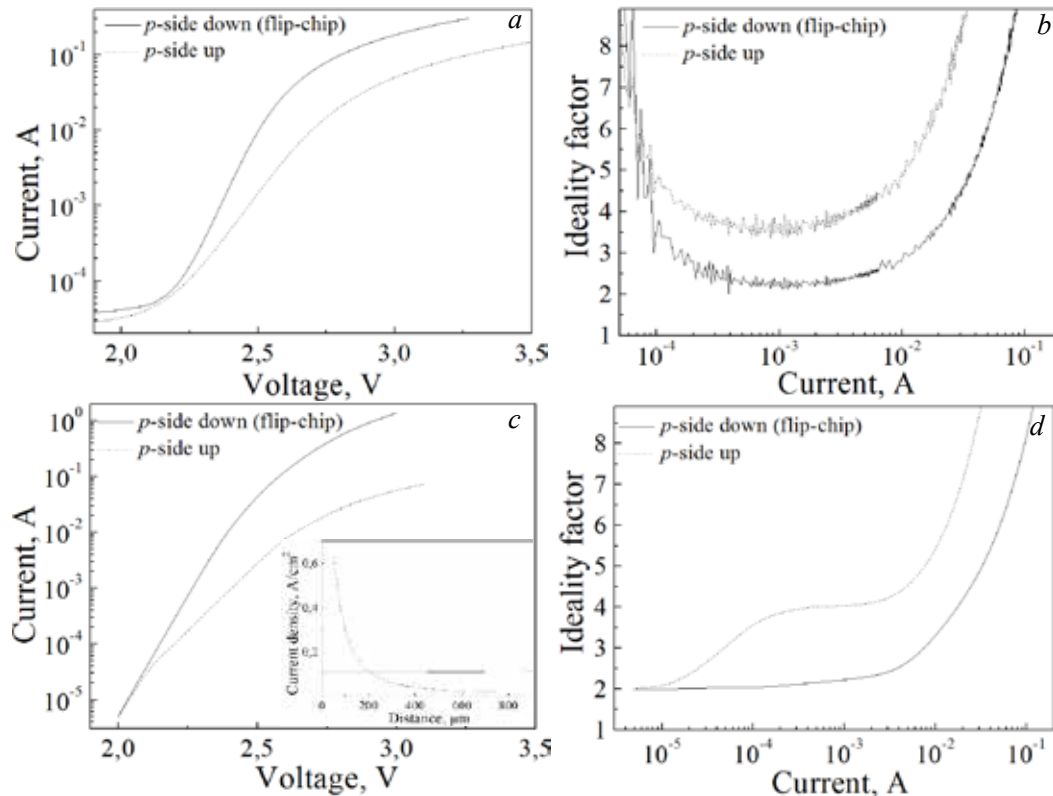


Fig. 2. Experimental (a, b) and calculated (c, d) I - V and β - I characteristics of the LEDs: solid lines – p -side down flip-chip structure (the current spreading contact geometry); dotted lines – p -side up structure (the current crowding contact geometry). The insert in (c) shows calculated local current density distributions in active layers of the LEDs at $I=5\text{ mA}$.

performed for both types of the LEDs. For the conventional p -side up structure we have performed the simulations with different widths of the p -contact from 50 to 900 μm . At $I=5$ mA in the flip-chip LED the current spreads practically uniform over the whole active layer (the insert in Fig.2(c)). Contrary to that, in the conventional p -side up LED, the length of the lateral current path (determined as the distance from the beginning of the p -contact to the position where the current density reduces to 50% of the value under the contact) decreases to a value as low as ≈ 100 μm . The smaller is the p -contact width, the smaller is the length of the lateral current path and thus the CC is stronger. In Fig. 2 (c, d) it is presented the simulated I - V and β - I characteristics for both types of LEDs. Inspection of these results yields that the shorter is the p -contact width, the higher becomes the device series resistance (R_s) that dominates in the high current range. While very low in the flip-chip LED ($R_s = 0.3$ Ω), this value increases by ~ 12 times in the conventional p -side up LED ($R_s = 3.5$ Ω). At the low currents, when the CC is negligible, all characteristics almost coincide and $\beta \approx 2$ for both LEDs (the shunt resistance was not taken into account in the simulations). However, in the intermediate range the ideality factors are significantly different. Particularly, $\beta \approx 2.1$ for the

current spreading geometry and $\beta \approx 4.0$ for the CC geometry. Despite the fact that the simulation was performed with identical internal parameters for all LEDs, the CC makes the “apparent” ideality factor to increase. This result shows that the ideality factor is not uniquely determined by carrier recombination and transport mechanism in the space charge region as it is predicted by classical one-dimensional theory of p - n junction.

Conclusion

In conclusion, we have investigated the CC effect on the p - n junction ideality factor in InGaN/GaN MQW LEDs on sapphire substrate. The results of the numerical simulations and the experimental tests indicate that the measurable ideality factor in LEDs employing lateral injection can not be considered as a pure internal parameter of the p - n junction. The CC effect makes the ideality factor to increase ($\beta > 2$). The classical one-dimensional theory of the p - n junction, in which β value is connected to the carrier transport mechanism and carrier recombination nature, can not be applied for LEDs with nonuniform current spreading. We show that the p - n junction ideality is not uniquely determined by carrier recombination and transport mechanisms in the quantum well/barrier structure but also depends on the device design.

BIBLIOGRAPHY:

1. Sah C., Noyce R.N., Shockley W. Carrier generation and recombination in p-n junctions and p-n junction characteristics. *Proc. IRE*. 1957, Vol.45, P. 1228-1957.
2. Casey H.C., Muth J., Krishnankutty S., Zavada J.M. Dominance of tunneling current and band filling in InGaN/AlGaIn double heterostructure blue light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* 1996, Vol.68, P. 2867-2869.
3. Perlin P., Osinski M., Eliseev P.G., Smagley V.A., Mu J., Banas M., Sartori P. Low-temperature study of current and electroluminescence in InGaN/AlGaIn/GaN double-heterostructure blue light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* 1996. Vol. 69, P. 1680-1682.
4. Mayes K., Yasan A., McClintock R., Shiell D., Darvish S.R., Kung P. and Razeghi M. High-power 280 nm AlGaIn light-emitting diodes based on an asymmetric single-quantum well. *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 84, P. 1046-1048.
5. Zhu D., Xu J., Noemaun A.N., Kim J.K., Schubert E.F., Crawford M.H., Koleske D.D. The origin of the high diode-ideality factors in GaInN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* 2009. Vol. 94, P. 081113-3.
6. Shah J.M., Li Y.-L., Gessmann Th. and Schubert E. F. Experimental analysis and theoretical model for anomalously high ideality factors ($n \gg 2.0$) in AlGaIn/GaN p-n junction diodes. *J. of Appl. Phys.* 2003. Vol. 94, P. 2627-2631.
7. Guo X., Schubert E. Current crowding in GaN/InGaIn light emitting diodes on insulating substrate. *J. of Appl. Phys.* 2001. Vol. 90, P. 4191-4195.
8. Hwang S. and Shim J. A Method for Current Spreading Analysis and Electrode Pattern Design in Light-Emitting Diodes. *IEEE Trans. Electron Dev.* 2008. Vol. 55, P. 1123-1128.
9. Xu J., Schubert M.F., Noemaun A.N., Zhu D., Kim J.K., Schubert E.F., Kim M.H., Chung H.J., Yoon S., Sone Ch. and Park Y. Reduction in efficiency droop, forward voltage, ideality factor, and wavelength shift in polarization-matched GaInN/GaN multi-quantum well light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* 2009. Vol. 94, P. 011113-3.
10. Dumin D.J., Pearson G.L. Properties of Gallium Arsenide Diodes between 4.2 and 300 K. *J. of Appl. Phys.* 1965, Vol. 36, P. 3418-3424.
11. Yang Y. and Cao X.A. Complete suppression of surface leakage currents in microperforated blue light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* 2009, Vol.95, P. 011109-3.

REFERENCES:

1. Sah, C., Noyce, R.N., & Shockley, W. (1957). Carrier generation and recombination in p-n junctions and p-n junction characteristics. *Proc. IRE*, 45, 1228-1957 [in English].
2. Casey, H.C., Muth, J., Krishnankutty, S., & Zavada, J.M.: (1996) Dominance of tunneling current and band filling in InGaN/AlGaIn double heterostructure blue light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 68, 2867-2869 [in English].
3. Perlin, P., Osinski, M., Eliseev, P.G., Smagley, V.A., Mu, J., Banas, M., & Sartori, P. (1996). Low-temperature study of current and electroluminescence in InGaN/AlGaIn/GaN double-heterostructure blue light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 69, 1680-1682 [in English].
4. Mayes, K., Yasan, A., McClintock, R., Shiell, D., Darvish, S.R., Kung, P., & Razeghi, M. (2004). High-power 280 nm AlGaIn light-emitting diodes based on an asymmetric single-quantum well. *Appl. Phys. Lett.*, 84, 1046-1048 [in English].
5. Zhu, D., Xu, J., Noemaun, A.N., Kim, J.K., Schubert, E.F., Crawford, M.H., & Koleske, D.D. (2009). The origin of the high diode-ideality factors in GaInN/GaN multiple quantum well light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 94, 081113-3 [in English].
6. Shah, J.M., Li, Y.-L., Gessmann, Th., & Schubert, E.F. (2003) Experimental analysis and theoretical model for anomalously high ideality factors ($n \gg 2.0$) in AlGaIn/GaN p-n junction diodes, *J. of Appl. Phys.*, 94, 2627-2631 [in English].
7. Guo, X., & Schubert, E. (2001). Current crowding in GaN/InGaIn light emitting diodes on insulating substrate. *J. of Appl. Phys.*, 90, 4191-4195 [in English].
8. Hwang, S., & Shim, J. (2008). A Method for Current Spreading Analysis and Electrode Pattern Design in Light-Emitting Diodes. *IEEE Trans. Electron Dev.*, 55, 1123-1128 [in English].
9. Xu, J., Schubert, M.F., Noemaun, A.N., Zhu, D., Kim, J.K., Schubert, E.F., Kim, M.H., Chung, H.J., Yoon, S., Sone, Ch., & Park, Y. (2009) Reduction in efficiency droop, forward voltage, ideality factor, and wavelength shift in polarization-matched GaInN/GaN multi-quantum well light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 94, 011113-3 [in English].
10. Dumin, D.J., & Pearson, G.L. (1965). Properties of Gallium Arsenide Diodes between 4.2 and 300 K'. *J. of Appl. Phys.*, 36, 3418-3424 [in English].
11. Yang, Y., & Cao, X.A. (2009). Complete suppression of surface leakage currents in microperforated blue light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.*, 95, 011109-3 [in English].

УДК 621.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-4>

Галина МИРОНЧУК

доктор фізико-математичних наук, професор, директор навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0002-9088-3825

SCOPUS-AUTHOR ID: 36245422900

Олександр ЯНЧУК

кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0003-0375-0475

SCOPUS-AUTHOR ID: 24287260700

Олег МАРЧУК

кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0002-5618-7156

SCOPUS-AUTHOR ID: 57191781842

Юрій ХМАРУК

аспірант, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025

Олексій ВИШНЕВСЬКИЙ

кандидат геолого-мінералогічних наук, провідний науковий співробітник, відділ проблем алмазності, Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення ім. М. П.Семененка НАН України, просп. Академіка Палладіна 34, м. Київ, Україна, 03142

ORCID ID: 0000-0002-7206-2185

SCOPUS-AUTHOR ID: 36621586300

Ірина МОРОЗ

кандидат технічних наук, доцент кафедри матеріалознавства, Луцький національний технічний університет, вул. Львівська, 75 м. Луцьк, Україна, 43018

ORCID ID: 0000-0001-9167-4876

SCOPUS-AUTHOR ID: 23489463200

Ярослав ЄНДРИКА

доктор інженерії кафедри автоматики, електротехніки і оптоелектроніки, Ченстоховський політехнічний університет, вул. Армії Крайової, м. Ченстохова, Республіка Польща, 42-200

ORCID ID: 0000-0002-7047-6624

SCOPUS-AUTHOR ID: 55053482500

Катаржина ОЗГА

доктор наук, професор кафедри автоматики, електротехніки і оптоелектроніки, Ченстоховський політехнічний університет, вул. Армії Крайової, м. Ченстохова, Республіка Польща, 42-200

ORCID ID: 0000-0002-4936-2278

SCOPUS-AUTHOR ID: 8403262900

Артур ВОЙЦЕХОВСЬКИ

доктор інженерії кафедри автоматики, електротехніки і оптоелектроніки, Ченстоховський політехнічний університет, вул. Армії Крайової, м. Ченстохова, Республіка Польща, 42-200

ORCID ID: 0000-0002-0071-2468

SCOPUS-AUTHOR ID: 16317943600

Бібліографічний опис статті: Мирончук, Г., Янчук, О., Марчук, О., Хмарук, Ю., Вишневський, О., Мороз, І., Єндрика, Я., Озга, К., Войцеховські, А. (2022). Вплив умов синтезу на властивості наночастинок CdS. *Фізика та освітні технології*, 2, 23–30, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-4>

ВПЛИВ УМОВ СИНТЕЗУ НА ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК CdS

Напівпровідникові нанокристали мають різноманітне практичне застосування, включаючи компоненти оптоелектронних транзисторів, флуоресцентні біологічні мітки, та інші. Відповідні матеріали демонструють хороші фотомеханічні характеристики завдяки добрій фототермічній стабільності у поєднанні з високою фонною ангармонічністю, яка характерна для халькогенідів. Проте все ще залишається проблема отримання дисперсних зразків малого розміру.

У цій роботі ми порівнюємо морфологію нанокристалів (НК) сульфїду кадмію (CdS), синтезованих електрохімічним шляхом як з PVS, так і з детергентом ATLAS G3300, тобто методами електролітичного синтезу з детергентом. Представлені структурні особливості НК CdS, а також їх нелінійно-оптичні властивості другого порядку. Описано методологію синтезу нанокристалів CdS, експериментальні методи, які застосовуються при структурних дослідженнях CdS нанопорошків, такі як рентгенівська порошкова дифракція та скануюча електронна мікроскопія. Аналіз показує, що синтезовані НК CdS характеризуються гексагональною або кубічною структурою, що відповідає типу вюрциту або сфалериту відповідно. Наведено приблизний вміст НК вюрциту та сфалериту. В синтезованих порошках явно домінує структура вюрциту (P63mc). Крім того, застосування детергенту ATLAS G3300 при синтезі НК призводить до практично незмінного співвідношення (3:1) вюрциту та сфалериту НК. Густина струму електролізу практично не впливає на співвідношення модифікацій вюрциту і сфалериту в отриманому CdS. У роботі продемонстровано СЕМ зображення нанопорошків CdS. Встановлено, що додавання до електроліту стабілізатора Atlas G3300 сприяє зменшенню розмірів частинок та зменшенню ступеня їх полідисперсності.

Дослідження генерації другої гармоніки було проведене для кращого розуміння нелінійно-оптичних властивостей, які дуже важливі для різних застосувань, наприклад, біосенсорів. Можна побачити, що розмір зерна має досить значний вплив на інтенсивність сигналу SHG. Фракції дрібніших частинок порошку дають нижчі сигнали SHG.

Ключові слова: Халькогеніди, наноструктури, генерація другої гармоніки.

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: 0000-0002-9088-3825

SCOPUS-AUTHOR ID: 36245422900

Oleksandr YANCHUK

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Chemistry and Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0003-0375-0475

SCOPUS-AUTHOR ID: 24287260700

Oleg MARCHUK

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Chemistry and Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0002-5618-7156

SCOPUS-AUTHOR ID: 57191781842

Yurii KHMARUK

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

Oleksii VYSHNEVSKIY

M.P.Semenenko Institute of Geochemistry, Mineralogy and Ore Formation NAS of Ukraine Kyiv, Academician Paladin 34, Kyiv, Ukraine, 03142

ORCID ID: 0000-0002-7206-2185

SCOPUS-AUTHOR ID: 36621586300

Iryna MOROZ

Department of Materials Science, Lutsk National Technical University 75 L'vivs'ka Str., Lutsk 43018, Ukraine

ORCID ID: 0000-0001-9167-4876

SCOPUS-AUTHOR ID: 23489463200

Jaroslav JEDRYKA

dr inż., Department of Automatic Control, Electrical Engineering and Optoelectronics, Częstochowa University Of Technology, Al. Armii Krajowej 17, 42-200 Częstochowa, Poland, 42-200

ORCID ID: 0000-0002-7047-6624

SCOPUS-AUTHOR ID: 55053482500

Katarzyna OZGA

Dr Hab., Prof. Częstochowa University Of Technology, Al. Armii Krajowej 17, 42-200 Częstochowa, Poland, 42-200

ORCID ID: 0000-0002-4936-2278

SCOPUS-AUTHOR ID: 8403262900

Artur WOJCIECHOWSKI

dr inż., Department of Automatic Control, Electrical Engineering and Optoelectronics, Częstochowa University Of Technology, Al. Armii Krajowej 17, 42-200 Częstochowa, Poland, 42-200

ORCID ID: 0000-0002-0071-2468

SCOPUS-AUTHOR ID: 16317943600

To cite this article: Myronchuk, G., Yanchuk, O., Marchuk, O., Khmaruk, Y., Vyshnevskiy, O., Moroz, I., Jedryka, J., Ozga, K., Wojciechowski, A. (2022). Vplyv umov syntezy na vlastyvoli nanochastynok CdS [Influence of synthesis conditions on the properties of CdS nanoparticles]. *Physics and Educational Technology*, 2, 23–30, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-4>

INFLUENCE OF SYNTHESIS CONDITIONS ON THE PROPERTIES OF CdS NANOPARTICLES

Semiconductor nanocrystals have diverse practical applications, including optoelectronic transistor components and fluorescent biological labels. Relevant materials exhibit good photomechanical features for laser operation basically due to good photo-thermal stability against external laser radiation combined with high phonon anharmonicity being typical for chalcogenides.

In this work, we compare the morphology of cadmium sulfide (CdS) nanocrystallines (NCs) synthesized electrochemically both with PVS and ATLAS G3300 detergent, i.e. detergent electrolytic synthesis methods. Presents the structural and morphological features of CdS NCs as well as their second-order nonlinear optical properties explored in SHG experiments. Describes the methodology of CdS NC synthesis, experimental techniques applied in structural studies of Cd NCs, such as X-ray powder diffraction and scanning electron microscopy. Analysis shows that synthesized CdS NCs are characterized either hexagonal or cubic structures corresponding to wurtzite or sphalerite type, respectively. An approximate content of wurtzite and sphalerite NCs is given. CdS of wurtzite structure (P63mc) evidently dominates here. Moreover, an applying of ATLAS G3300 detergent in NC synthesis results to practically constant ratio (3:1) of wurtzite to sphalerite NCs. The electrolysis current density, practically does not affect the ratio of wurtzite and sphalerite modifications in the resulting CdS. In with work demonstrate SEM images of CdS NC powders. It was established that the addition of Atlas G3300 stabilizer to the electrolyte contributes to the reduction of particle size and the degree of polydispersity. The nonlinear optical responses of CdS were investigated to better understand the nonlinear optical properties, which are very important for applications (e.g., biosensors). One may see that the grain size exhibits rather significant effect on the intensity of the SHG signal. Fractions of finer powder particles give lower SHG signals.

Key words: Chalcogenides, nanostructures, second harmonic generation.

Напівпровідникові нанокристали CdS мають різноманітне практичне застосування, включаючи компоненти оптоелектронних транзисторів, флуоресцентні біологічні мітки, та інше [1-4]. Відповідні матеріали демонструють хороші фотомеха-

нічні характеристики завдяки добрій фототермічній стабільності [5] у поєднанні з високою фонною ангармонічністю, яка характерна для халькогенідів [6-7]. Проте все ще залишається проблема отримання дисперсних зразків малого розміру.

Відомо, що структура, розміри й оптичні властивості наночастинок залежать від природи прекурсорів, стабілізаторів і розчинників. Важливу роль тут відіграють стабілізатори, за допомогою яких контролюють розмір і форму наночастинок, запобігають їх агрегації та поверхневому окисненню. Для синтезу нанорозмірних частинок широко використовуються водорозчинні полімери або інші поверхнево-активні речовини (полівініловий спирт, поліетиленоксид, полівінілпірролідон, желатин, пометакрилову кислоту тощо). Вибір цих сполук зумовлений тим, що будучи оптимальними матричними матеріалами, вони проявляють високу інтегрованість із неорганічними речовинами та мають низьку вартість [8].

В нашій роботі синтез кадмій сульфідів проводиться шляхом електролізу водного розчину натрій хлориду (58,44 г/л або 1,0 М) і тіокарбаміду (15,22 г/л або 0,20 М) у присутності полівінілового спирту (ПВС, 10 г/л) (зразки серії А) або Atlas G3300 (1.0 г/л) (зразки серії D) з розчинним кадмієвим анодом за 363,2 К та різної густини струму. AtlasG3300 – торгова марка аніонної поверхнево-активної речовини, яка є сумішшю 2-додецилбензенсульфонові кислоти і 2-пропанаміну у співвідношенні 1:1. Вона має хімічну формулу (C₂₁H₃₈NO₃S) із молярною масою 384,596. Електроліз тривав 20 хвилин у всіх експериментах. Деякі основні параметри синтезу представлені в таблицях 1 та 2.

Таблиця 1

Умови електрохімічного синтезу досліджуваного кадмій сульфідів у присутності полівінілового спирту

Зразок	A01	A02	A03	A04
Сила струму, А	2,5	2,0	1,5	1,0
Густина струму, А/см ²	0,5	0,4	0,3	0,2
Напруга, В	7,9	7,4	5,2	4,0

Таблиця 2

Умови електрохімічного синтезу досліджуваного кадмій сульфідів у присутності AtlasG3300

Зразок	D03	D05	D07	D09	D11
Сила струму, А	0,56	0,93	1,4	1,8	2,2
Густина струму, А/см ²	0,112	0,186	0,28	0,36	0,44
Напруга, В	2,2	3,8	5,7	6,4	8,2

Хлорид натрію, тіокарбамід і ПВС/Atlas G3300 зважували та переносили в мірну колбу

на 200 мл і розчиняли у гарячій дистильованій воді. Вміст колби доводили до мітки за температури експерименту (90 °С) в термостаті. Отриманий розчин переносили в стакан на 400 мл (електролізер), а циліндричні кадмієвий і сталевий електроди з площею поверхні 5,0 см² були занурені в розчин та підключені до джерела живлення В5-46. На один експеримент потрібно близько 200 мл приготованого розчину. Електролізер із зануреними електродами та контактним і звичайним термометром поміщали в термостат. Після нагрівання до потрібної температури одночасно вмикали джерело живлення та секундомір. Після розчинення анода відразу почали утворюватися і осідати на дно стакана помаранчеві частинки. Коли час синтезу було вичерпано, електролізер розмонтували, а стакан з утвореною суспензією виймали з термостата і залишали охолоджуватися до температури навколишнього середовища.

Після охолодження вміст стакана, в якому відбувся електроліз, виливали у більший стакан з дистильованою водою і залишали до наступного дня для повного осідання порошку. Наступного дня розчин над порошком зливали і доливали у стакан дистильованої води. Отриману суспензію залишали до наступного дня. Порошкоподібний осад продукту електролізу промивали біля 15 разів. Після цього осад переносили в чашку Петрі і залишали її на добу в сушильній шафі за 50 °С. Кадмієві електроди промивали дистильованою водою після їх сушіння на повітрі та зважували. [9].

Синтезовані помаранчеві порошки досліджували за допомогою скануючої електронної мікроскопії та рентгенівської порошкової дифракції (дифрактометр DRON-4-13, Cu-Kα випромінювання).

Рентгенограми усіх зразків представлені на рис. 1 та 2. Дифракційна картина всіх зразків містить відбиття, що відповідають теоретичним діаграмам для просторової групи *P6₃mc* (позначена синьою лінією) і *F43m* кадмій сульфідів (помаранчева лінія). Таким чином, одержаний порошкоподібний продукт є чистим кадмій сульфідом зі змішаною гексагональною та кубічною структурою типу вюрциту та сфалериту відповідно.

За допомогою програми PowderCell2.4 визначено вміст сфалериту та вюрциту в усіх отриманих зразках кадмій сульфідів наведено в табл. 3.

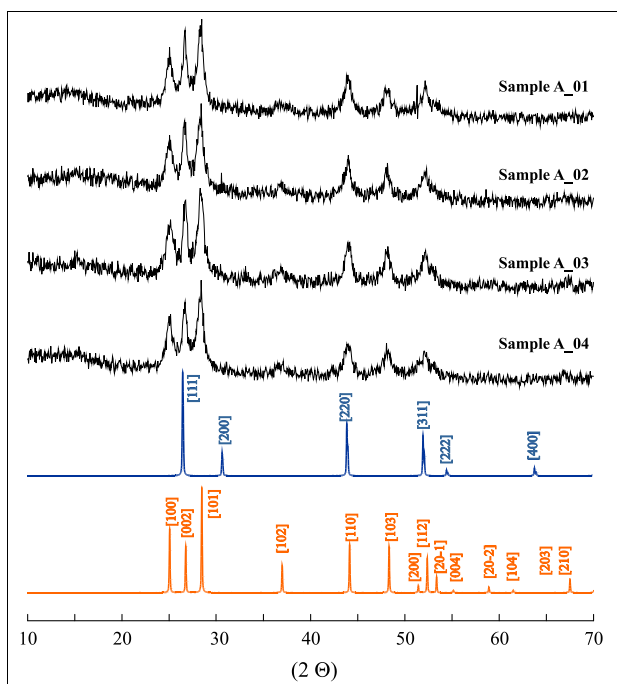


Рис. 1. Експериментальні та теоретичні порошкограми зразків кадмій хлориду, синтезованих за однакової температури (90°C), часу електролізу (20 хв), концентрації NaCl (1,0 моль/л), концентрації тіокарбаміду (0,2 моль/л), вмісту ПВС (10 г/л), але різної густини струму (А/см²): а) А01 – 0,5; А02 – 0,4; зразок А03 – 0,3; А04 – 0,2.

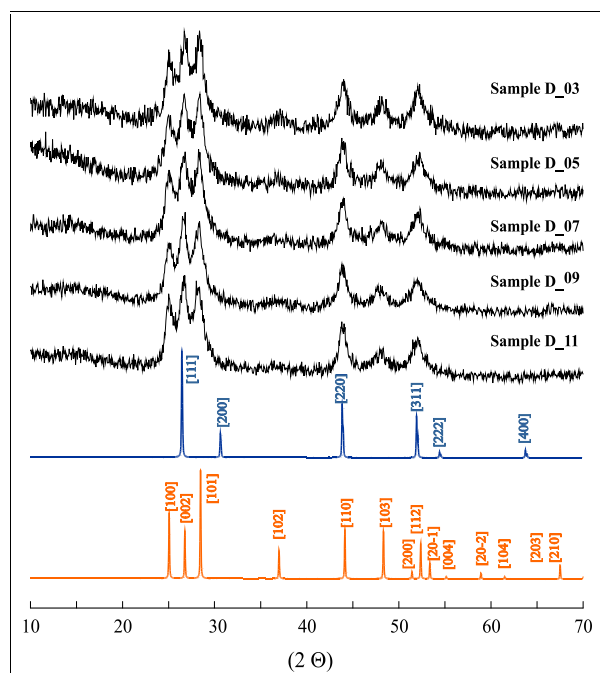


Рис. 2. Експериментальні та теоретичні порошкограми зразків сульфід кадмію, синтезованих за однакової температури (90°C), часу електролізу (20 хв), концентрації NaCl (1,0 М), концентрації тіокарбаміду (0,2 М), вмісту Atlas G3300 (1,0 г/л), але різної густини струму (А/см²): D03 – 0,112; D05 – 0,186; D07 – 0,280; D09 – 0,360; D11 – 0,440.

Таблиця 3
**Вміст сфалериту (CdS_F4-3m)
та вюрциту (CdS_P6-3m)**

Зразок	A01	A02	A03	A04	D03	D05	D07	D09	D11
Вміст вюрциту, %	82	88	81	85	75	76	74	74	72
Вміст сфалериту, %	18	12	19	15	25	24	26	26	28

Так, у структурі кадмій сульфіді істотно переважає вюрцит. Не виявлено закономірностей впливу густини струму на співвідношення модифікацій вюрциту і сфалериту в отриманому порошку кадмій сульфіді. Присутність поверхнево-активної речовини Atlas G3300 сприяє одержанню кадмій сульфіді з співвідношенням вюрцитної і сфалеритної модифікацій яка змінюється від 3,2:1 до 2,6:1. Це ж співвідношення при синтезі CdS у присутності полівінілового спирту змінюється від 7,3:1 до 2,7:1.

Морфологію та розмір синтетичного CdS визначали за допомогою польового скануючого електронного мікроскопа JSM-6700F ("JEOL")

в інституті геохімії, мінералогії та рудоутворення імені М.П. Семененка НАН України (ІГМР НАНУ). Перед дослідженням зразків їх покривали методом розпилення платиновою плівкою товщиною 30 Å. Умови роботи візуалізації були такими: режим SE, прискорювальна напруга 10 кВ та пучковий струм 0,65 нА. Як показано на рис. 3 і 4, частинки мають форму переважно пластівців. Не виявлено суттєвого впливу густини струму електролізу на середні діаметри частинок в обох випадках.

Частинки порошку серії А мають розміри в широкому діапазоні від 5 до 100 нм. Діаметр пластівців – 15÷100 нм, а товщина – 5÷25 нм. Середні діаметри частинок знаходяться в діапазоні 35÷40 нм. ПВС спричиняє значний розкид частинок за розмірами.

Діаметри найдрібніших частинок серії D знаходяться в інтервалі від 11 до 20 нм. Суттєво за числом переважають частинки, що знаходяться в інтервалі від 21 до 30 нм. Розподіл числа частинок за діапазонами розмірів для цих частинок є досить вузьким. Діаметри найкрупніших

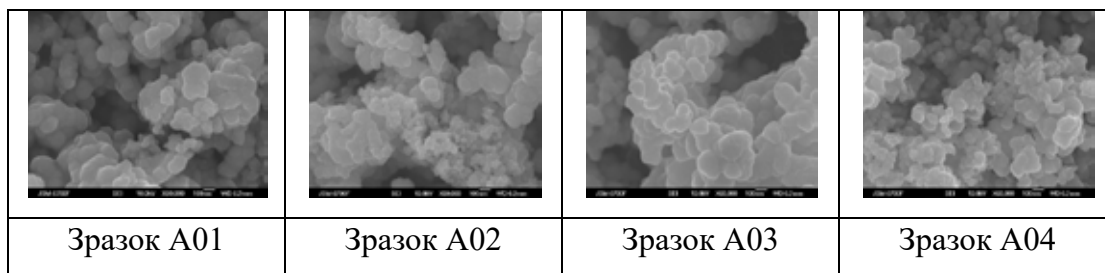


Рис. 3. SEM-зображення зразків сульфїду кадмію, синтезованих за однакової температури (90 °C), часу електролізу (20 хв), концентрації NaCl (1,0 моль/л), концентрації тіокарбамїду (0,2 моль/л), вмісту ПВС (10 г/л), але різної густини струму (А/см²): A01 – 0,5; A02 – 0,4; A03 – 0,3; A04 – 0,2

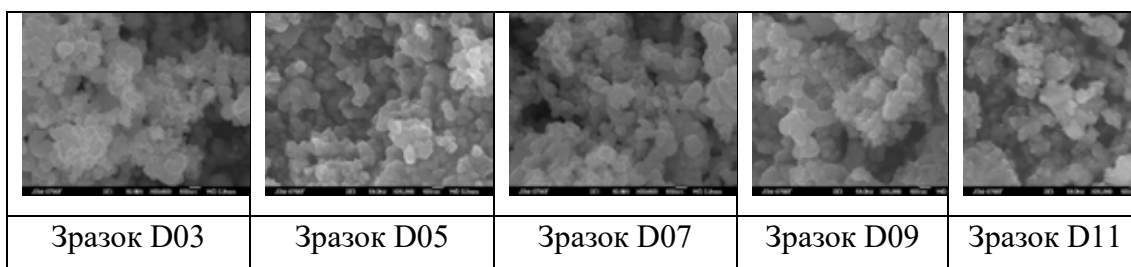


Рис. 4. SEM-зображення зразків сульфїду кадмію, синтезованих за однакової температури (90 °C), часу електролізу (20 хв), концентрації NaCl (1,0 М), концентрації тіокарбамїду (0,2 М), вмісту Atlas G3300 (1,0 г/л), але різної густини струму (А/см²): D03 – 0,112; D05 – 0,186; D07 – 0,280; D09 – 0,360; D11 – 0,440

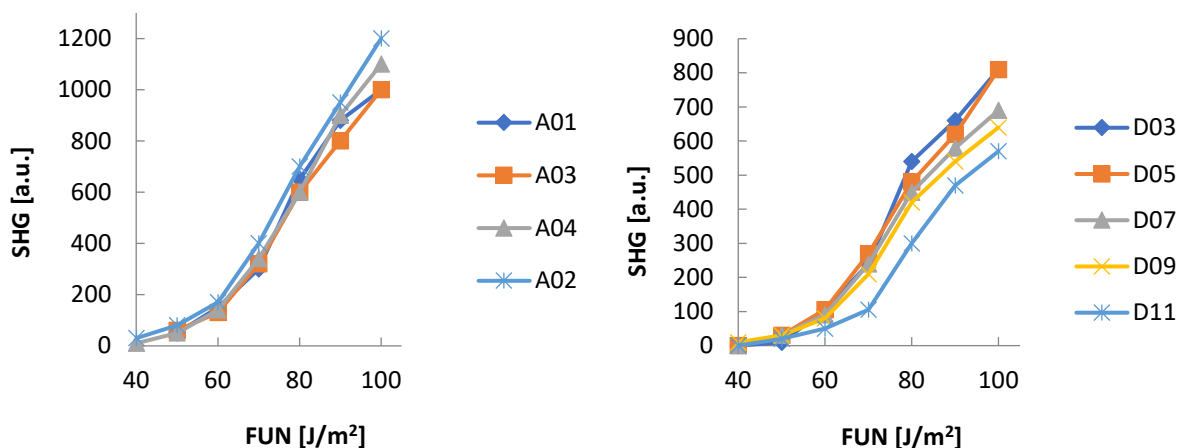


Рис. 5. Залежність ефективності генерації другої гармонїки від основної густини лазерної енергїї

частинок є в інтервалі від 51 до 60 нм. Середній розмір частинок є в інтервалі від 23 до 29 нм. Таким чином додавання до електроліту стабілізатора Atlas G3300 сприяє зменшенню розмірів частинок та зменшенню ступеня їх полідисперсності.

Серед оптоелектронних функцій, керованих лазером, ми зосереджені на дослідженнях індукованої лазером генерації другої гармонїки

(SHG), що представляє нелїнійний оптичний ефект другого порядку, який описується полярним тензором третього рангу.

Можна побачити, що інтенсивність сигналу ГДГ залежить від розмір зерна та симетрії кристалїчної ґратки, що добре узгоджується з даними робіт [10-11]. Фракції дрібніших частинок порошку дають нижчі сигнали SHG. Максимальні

коефіцієнти досягаються при 88% вюрцитного компонента CdS. При іншому вмісті вюрциту ці значення менші. Це є відображенням значної ролі розмірів, морфології зерен та ацентричних

кристалітів у спостережуваних залежностях, що може бути використано для подальшого пошуку лазерно-керованих матеріалів у майбутньому розвитку лазерних модуляторів і тригерів.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Jaiswal J.K., Mattoussi H., Mauro J.M. and Simon S.M. Long-term multiple color imaging of live cells using quantum dot bioconjugates. *Nat. Biotechnol.* 2003. Vol. 21. P. 47-51.
2. Brown K.R., Lidar D.A. and Whaley K.B. Quantum computing with quantum dots on quantum linear supports. *Phys. Rev.* 2002. Vol. A65. 012307.
3. Chan W.C.W., Maxwell D.J., Gao X.H., Bailey R.E., Han M.Y and Nie S.M. Luminescent quantum dots for multiplexed biological detection and imaging. *Curr. Opin. Biotechnol.* 2002. Vol. 13, P.40-46.
4. Sweeney R.Y., Mao C., Gao X., Burt J.L., Belcher A.M., Georgiou G. and Iverso B.L. Bacterial biosynthesis of cadmium sulfide nanocrystals. *Chem. Biol.* 2004. Vol. 11. P.1553-1559.
5. Ozga K., Yanchuk O.M., Tsurkova L.V., Marchuk O.V., Urubkov I.V., Romanyuk Y.E., Fedorchuk O., Lakshminarayana G. and Kityk I.V. Operation by optoelectronic features of cadmium sulphide nanocrystallites embedded into the photopolymer polyvinyl alcohol matrices. *Appl. Surf. Sci.* 2018. Vol. 446. p. 209-214.
6. Parasyuk O.V., Babizhetskyy V.S., Khyzhun O.Y., Levytsky V.O., Kityk I.V., Myronchuk G.L., Tsisar O.V., Piskach L.V., Jedryka J., Maciag A. and Piasecki M. Novel quaternary TlGaSn₂Se₆ single crystal as promising material for laser operated infrared nonlinear optical modulators. *Crystals.* 2017. Vol.7. P. 341-357.
7. Krymus A.S., Myronchuk G.L., Parasyuk O.V., Lakshminarayana G., Fedorchuk A.O., El-Naggar A., Albassam A. and Kityk I.V. Photoconductivity and nonlinear optical features of novel Ag_xGaxGe_{1-x}Se₂ crystals. *Mater. Res. Bull.* 2017. Vol. 85. P. 74-79.
8. Ozga K., Yanchuk O.M., Tsurkova L.V., Marchuk O.V., Urubkov I.V., Romanyuk Y.E., Fedorchuk O., Lakshminarayana G., Kityk I.V. Operation by optoelectronic features of cadmium sulphide nanocrystallites embedded into the photopolymer polyvinyl alcohol matrices. *Applied Surface Science.* 2018. Vol. 446. P. 209-214.
9. Патент 93471U Україна, МПК (2014.01) С 01G 11/00, Спосіб отримання нанопорошків кадмій сульфід електронізмом водного розчину індиферентного електроліту, заявник та патентний власник Східноєвропейський нац. ун-т імені Лесі Українки. - № u201313037; Заявл. 11.11.2013; опубл. 10.10.2014. Бюл. № 9. - 3 с.
10. Banerjee R., Jayakrishnan R. and Ayyub P. Effect of the size-induced structural transformation on the band gap in CdS nanoparticles. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2000. Vol.12. p.10647-10654.
11. Michal Jacobsohn and Uri Banin. Size Dependence of Second Harmonic Generation in CdSe Nanocrystal Quantum Dots. *Phys. Chem. B.* 2000. Vol.104(1) 1-5.

REFERENCES:

1. Jaiswal J.K., Mattoussi H., Mauro J.M. and Simon S.M. Long-term multiple color imaging of live cells using quantum dot bioconjugates. *Nat. Biotechnol.* 2003. Vol. 21. P. 47-51.
2. Brown K.R., Lidar D.A. and Whaley K.B. Quantum computing with quantum dots on quantum linear supports. *Phys. Rev.* 2002. Vol. A65. 012307.
3. Chan W.C.W., Maxwell D.J., Gao X.H., Bailey R.E., Han M.Y and Nie S.M. Luminescent quantum dots for multiplexed biological detection and imaging. *Curr. Opin. Biotechnol.* 2002. Vol. 13, P.40-46.
4. Sweeney R.Y., Mao C., Gao X., Burt J.L., Belcher A.M., Georgiou G. and Iverso B.L. Bacterial biosynthesis of cadmium sulfide nanocrystals. *Chem. Biol.* 2004. Vol. 11. P.1553-1559.
5. Ozga K., Yanchuk O.M., Tsurkova L.V., Marchuk O.V., Urubkov I.V., Romanyuk Y.E., Fedorchuk O., Lakshminarayana G. and Kityk I.V. Operation by optoelectronic features of cadmium sulphide nanocrystallites embedded into the photopolymer polyvinyl alcohol matrices. *Appl. Surf. Sci.* 2018. Vol. 446. p. 209-214.
6. Parasyuk O.V., Babizhetskyy V.S., Khyzhun O.Y., Levytsky V.O., Kityk I.V., Myronchuk G.L., Tsisar O.V., Piskach L.V., Jedryka J., Maciag A. and Piasecki M. Novel quaternary TlGaSn₂Se₆ single crystal as promising material for laser operated infrared nonlinear optical modulators. *Crystals.* 2017. Vol.7. P. 341-357.
7. Krymus A.S., Myronchuk G.L., Parasyuk O.V., Lakshminarayana G., Fedorchuk A.O., El-Naggar A., Albassam A. and Kityk I.V. Photoconductivity and nonlinear optical features of novel Ag_xGaxGe_{1-x}Se₂ crystals. *Mater. Res. Bull.* 2017. Vol. 85. P. 74-79.
8. Ozga K., Yanchuk O.M., Tsurkova L.V., Marchuk O.V., Urubkov I.V., Romanyuk Y.E., Fedorchuk O., Lakshminarayana G., Kityk I.V. Operation by optoelectronic features of cadmium sulphide nanocrystallites embedded into the photopolymer polyvinyl alcohol matrices. *Applied Surface Science.* 2018. Vol. 446. P. 209-214.

9. Патент 93471U Україна, МПК (2014.01) С 01G 11/00, Спосіб отримання нанопорошків кадмій сульфід електролізом водного розчину індиферентного електроліту, заявник та патентний власник Східноєвропейський нац. ун-т імені Лесі Українки. - № u201313037; Заявл. 11.11.2013; опубл. 10.10.2014. Бюл. № 9. 3 с.

10. Banerjee R., Jayakrishnan R. and Ayyub P. Effect of the size-induced structural transformation on the band gap in CdS nanoparticles. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2000. Vol. 12. p. 10647–10654.

11. Michal Jacobsohn and Uri Banin. Size Dependence of Second Harmonic Generation in CdSe Nanocrystal Quantum Dots. *Phys. Chem. B.* 2000. Vol.104(1) 1–5.

УДК 372.51

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-5>

Микола САДОВИЙ

доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри технологічної та професійної освіти, Центральноукраїнський державний педагогічний університет імені Володимира Винниченка, вул. Шевченко 1, м. Кропивницький, Україна, 25006, e-mail: smikdri@i.ua

ORCID ID: 0000-0001-6582-6506

SCOPUS-AUTHOR ID: 57217117696

Олена ТРИФОНОВА

доктор педагогічних наук, доцент, доцент кафедри природничих наук і методик їхнього навчання, Центральноукраїнський державний педагогічний університет імені Володимира Винниченка, вул. Шевченко 1, м. Кропивницький, Україна, 25006, e-mail: olenatrifonova82@gmail.com

ID ORCID: 0000-0002-6146-9844

SCOPUS-AUTHOR ID: 57217117658

Бібліографічний опис статті: Садовий, М., Трифонова, О. (2022). Методологічний підхід у наукових дослідженнях при підготовці кваліфікаційних робіт студентами природничої, технологічної та професійної галузей освіти. *Фізика та освітні технології*, 2, 31–38, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-5>

**МЕТОДОЛОГІЧНИЙ ПІДХІД У НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ
ПРИ ПІДГОТОВЦІ КВАЛІФІКАЦІЙНИХ РОБІТ СТУДЕНТАМИ ПРИРОДНИЧОЇ,
ТЕХНОЛОГІЧНОЇ ТА ПРОФЕСІЙНОЇ ГАЛУЗЕЙ ОСВІТИ**

Проблема співвідношення новітніх і класичних наукових ідей залишається нагальною для дослідників. Особливого значення вона набуває у педагогічних дослідженнях. Швидкісне впровадження у виробничі процеси нанотехнологій привело нас до висновку про доцільність зробити ґрунтовний науково-методологічний аналіз співвідношення новітніх і класичних понять у змісті освітніх компонент підготовки майбутніх фахівців природничої, технологічної та професійної галузей освіти. Практику реалізація цих наукових досліджень ми пропонуємо здійснювати шляхом виконання дослідницьких проєктів, курсових і кваліфікаційних робіт тощо. Сутність полягає в організації наукової діяльності, виявленні й активізації творчого інтелекту суб'єктів навчання, що забезпечує здобуття й практичне використання нових знань й отримання наукової продукції. Алгоритм вказаного здійснюється через: створення проблеми → формування гіпотези → використання нових методів дослідження → узагальнення результатів дослідження. Мета статті: виходячи з сучасних освітніх парадигм обґрунтувати підходи до вивчення проблеми розвитку методології в наукових дослідженнях під час проведення студентських досліджень в галузі природничих наук, технологій, професійної освіти. У статті поняття методології наукового дослідження розглядається як висхідне положення, стрижнева розвивальна ідея проблеми. Для прикладу реалізації методології дослідження, що забезпечує формування у суб'єктів навчання системного мислення ми пропонуємо розглянути розподіл Максвелла, де системно представлено співвідношення енергії та частоти коливань макро- та мікро- збуджених систем. Вцілому запропонований приклад реалізації дослідження сприяє формуванню у студентів системного мислення. Перспективу подальшого дослідження вбачаємо у моделюванні зазначених процесів із використанням комп'ютерного програмування.

Ключові слова: методологія дослідження, системне мислення, розподіл Максвелла, наукове дослідження, дослідницький проєкт.

Mykola SADOVYI

Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Head of the Department of Technological and Professional Education of Volodymyr Vynnychenko Central Ukrainian State Pedagogical University, St. Shevchenko 1, Kropyvnytskyi, Ukraine, 25006, e-mail: smikdpu@i.ua

ORCID ID: 0000-0001-6582-6506

SCOPUS-AUTHOR ID: 57217117696

Olena TRYFONOVA

Doctor of Pedagogical Sciences, Associate Professor, Associate Professor of Department of Natural Sciences and their Teaching Methods of Volodymyr Vynnychenko Central Ukrainian State Pedagogical University, St. Shevchenko 1, Kropyvnytskyi, Ukraine, 25006, e-mail: olenatryfonova82@gmail.com

ID ORCID: 0000-0002-6146-9844

SCOPUS-AUTHOR ID: 57217117658

To cite this article: Sadovyi, M., Tryfonova, O. (2022). Metodolohichnyy pidkhid u naukovykh doslidzhennyakh pry pidhotovtsi kvalifikatsiynykh robit studentamy pryrodnychoyi, tekhnolohichnoyi ta profesiynoyi haluzey osvity [Methodological approach in scientific research during the preparation of qualification papers by students of natural, technological and professional fields of education]. *Physics and Educational Technology*, 2, 31–38, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-5>

METHODOLOGICAL APPROACH IN SCIENTIFIC RESEARCH DURING THE PREPARATION OF QUALIFICATION PAPERS BY STUDENTS OF NATURAL, TECHNOLOGICAL AND PROFESSIONAL FIELDS OF EDUCATION

The problem of the ratio of modern and classic scientific ideas remains urgent for researchers. It acquires special importance in pedagogical research. The rapid introduction of nanotechnologies into production processes led us to the conclusion that it is expedient to conduct a thorough scientific and methodological analysis of the ratio of the latest and classical concepts in the content of the educational components of the training of future specialists in the natural, technological and professional fields of education. We offer the implementation of these scientific studies through the implementation of research projects, course and qualification papers, etc. The essence is the organization of scientific activity, the identification and activation of the creative intelligence of subjects of study, which ensures the acquisition and practical use of new knowledge and the production of scientific products. The above algorithm is carried out through: problem creation → hypothesis formation → use of new research methods → generalization of research results. The purpose of the article: based on modern educational paradigms, to justify approaches to the study of the problem of methodology development in scientific research during student research in the field of natural sciences, technologies, and professional education. In the article, the concept of the methodology of scientific research is considered as an ascending position, a core development idea of the problem. For an example of the implementation of the research methodology, which ensures the formation of system thinking in the subjects of training, we suggest considering Maxwell's distribution, which systematically presents the ratio of energy and frequency of oscillations of macro- and micro-excited systems. In general, the proposed example of research implementation contributes to the formation of systemic thinking in students. We see the prospect of further research in the modeling of these processes using computer programming.

Key words: research methodology, systems thinking, Maxwell's distribution, scientific research, research project.

Актуальність проблеми. Упровадження ідеї співвідношення новітніх наукових ідей та класичної науки залишається нагальною проблемою. Особливого значення ця проблема набуває у педагогічних дослідженнях, зокрема методиці навчання природничих наук, технологій та професійної освіти. Швидкісне впровадження у виробничі процеси нанотехнологій привело нас до висновку про доцільність зробити ґрунтовний науково-методологічний аналіз співвідношення новітніх і класичних понять у змісті освітніх компонент підготовки

майбутніх фахівців природничої, технологічної та професійної галузей освіти. Практична реалізація таких наукових досліджень може здійснюватися шляхом виконання дослідницьких проєктів, виконання курсових і кваліфікаційних робіт, рефератів тощо. Сутність якраз і полягає в організації наукової діяльності, виявленні й активізації творчого інтелекту суб'єктів навчання, що забезпечує здобуття й практичне використання нових знань й отримання наукової продукції. Алгоритм вказаного здійснюється через: створення проблеми → форму-

вання гіпотези → використання нових методів дослідження → узагальнення і систематизацію результатів наукової діяльності.

Аналіз останніх досліджень і публікацій.

Окресленням методології в наукових педагогічних дослідженнях узагальненого характеру ґрунтовно займалися Ю. Бабанський, Б. Гершунський, С. Гончаренко, В. Краєвський, В. Кремень, Н. Кузьміна, В. Садовський, М. Скаткин, В. Сластьонін, О. Сухомлинська П. Файербенд, В. Шубінський, Г. Щедровицький, Г. Цехмістрова, Е. Юдін та ін. Вони розглянули ґрунтовні концепції системних досліджень, визначили для педагогічних досліджень рівні методологічного аналізу, виділили структурні елементи системного підходу та діалектики. Значно менше ця проблема дістала розвитку в дослідженнях природничої, технологічної та професійної галузей освіти.

Вивчення студентами основ наукових досліджень, основ інженерно-педагогічних досліджень, де провідним є методологія, визначає їх професійне становлення, особливо при набутті досвіду написання курсових, кваліфікаційних та інших робіт, рефератів, проектів. Цьому напрямку присвятили свої дослідження А. Кузьмінський (Кузьмінський А. та ін., 2014), В. Романчиков (Романчиков В., 2007), Г. Цехмістрова (Цехмістрова Г., 2004), А. Єріна, В. Захожай, Д. Єрін (Єріна А., Захожай В., Єрін Д., 2004), В. Шейко, Н. Кушнарєнко (Шейко В., Кушнарєнко Н., 2002), Н. Бурау, В. Антонюк, Д. Півторак (Бурау Н., Антонюк В., Півторак Д., 2021).

Безумовно, такий підхід вимагає від формування у суб'єктів навчання системного мислення. Ряд американських психологів, зокрема науковець Дж. Гараєдагі розрізняє три покоління у розвитку системного мислення. До першого покоління він відносить рівень системного мислення, що відповідає рівням розвитку складним механістичним детермінованим системам. Епоха кібернетики та відкритих систем віднесена до другого рівня системного мислення, де розглядалася проблема взаємозалежності і самоорганізації систем. Третьому поколінню властива потрійна проблема взаємозалежності, самоорганізації і вибору в організованих системах (Гараєдагі Дж., 2007).

Теорія самоорганізації розглядається як розвиток від упорядкування до стану хаосу і більш вищого рівня розвитку систем, чим займалися

І. Прігожин, І. Стенгерс, А. Стьопін, Г. Хакен та ін. (Стьопін А., 2006).

Мета дослідження: виходячи з сучасних освітніх парадигм обґрунтувати підходи до вивчення проблеми розвитку методології в наукових дослідженнях під час проведення студентських досліджень в галузі природничих наук, технологій, професійної освіти.

Виклад основного матеріалу дослідження. У статті поняття методології наукового дослідження розглядається як висхідне положення, стрижнева розвивальна ідея проблеми. Вона розглядається поза меж наукової теми дослідження і, безумовно, не виводяться обраного дослідження. В її основі функціонують неінституціональні (поняття інститут є первинним елементом рушійної сили в освіті) і біхевіористський (в основі учіння лежить спостереження) підходи. Виходячи з цього методологія базується на принципах детермінізму, єдності психіки та діяльності, об'єктивності та розвитку (Юринець В., 2011). Ми використовуємо (Абрамова О., Куценко Т., Садовий М., Соменко Д., Трифонова О., 2020) вказані поняття для опису методик, методів і методології у залежності від типу і особливостей діяльності студентів у залежності від вимог закладу освіти та наукового керівника.

Виходячи з визначених підходів ми дослідили співвідношення енергії макро- й мікросистем та частоти поширення коливань у збудженому матеріальному середовищі. Зокрема, з введенням в фізику М. Фарадеєм електричного та магнітного полів і наступним фундаментальним вивченням цих поняття Дж. Максвеллом привело до виникнення проблеми існування максимальної швидкості поширення збуджень у матеріальному середовищі та в цілому максимальної швидкості руху в природі. Такою швидкістю виявилася швидкість поширення світла у вакуумі. При цьому відпало поняття «далекодія».

У цьому зв'язку розглядаючи проблему, що є спільного у спектрах механічних та оптичних коливань приходимо до висновків: у механічних процесах зміна зовнішніх умов коливального процесу приводить до зміни частоти основного тону та всіх його гармонік; оптичні спектри відносяться до атомних; у дискретних атомних системах всі елементи мають одну й ту ж власну частоту коливань, які зв'язані між собою

певними квантовими законами; макроскопічних коливальних системах незмінність частоти коливань може підтримуватися незмінно неперервно за рахунок амплітуди коливань; в атомних системах енергія може змінюватися лише дискретно зі зміною частоти коливань. Звідси випливає проблема дослідження зв'язку енергії коливань макро- й мікротіл із їх частотою коливань.

Для забезпечення формування у суб'єктів навчання системного мислення запропонуємо їм знайти зв'язок між енергією і частотою коливань для макроскопічного тіла A , наприклад, у випадку математичного маятника. Простежимо як будуть змінюватися характеристики системи при поступовій, плавній зміні амплітуди маятника l . Під плавністю зміни амплітуди на Δl будемо розуміти процес великої кількості періодів за такої довжини. Зменшення довжини маятника приведе до збільшення його частоти коливань ν . Необхідно дослідити, як при цьому буде вести себе енергія E . Зауважимо, що зменшення амплітуди пов'язане зі співвідношенням $\Delta E = \frac{l\alpha^2}{2}$ (рис. 1).

Силу, з якою проводимо зменшення амплітуди коливання маятника можна розглядати як результат двох складових. Одна зрівноважує силу тяжіння вздовж лінії маятника $F_n = F_1 = mg \cos \alpha$. Другою складовою є доцентрова сила $F_2 = \frac{mv^2}{l}$. Згідно законів механіки кожна з цих сил виконує роботу, коли поступово зменшуємо довжину маятника на величину Δl .

$A_1 = -F_1 \Delta l = -\Delta l mg \cos \alpha$, $\cos \alpha_{cp}$ – є середнім значенням α для визначеної зміни Δl довжини маятника. З початкових умов можна визначити граничний кут α_{cp} відхилення маятника. Для малих змін кута відхилення використаємо співвідношення $\cos \alpha = 1 - \frac{\alpha^2}{2}$. Тоді $\cos \alpha = 1 - \frac{\alpha_{cp}^2}{4}$. Підставимо одержані вирази у формулу для визначення роботи при зміні довжини маятника на малу величину $A_1 = -\Delta l mg \left(1 - \frac{\alpha_{cp}^2}{4}\right)$.

Далі визначимо роботу доцентрової сили $A_2 = -F_2 \Delta l = -\frac{mv^2}{l} \Delta l$, $\overline{v^2}$ – середній квадрат швидкості руху кульки маятника. Враховуючи $\overline{v^2} = \frac{l^2 \omega^2 \alpha_{cp}^2}{2}$ знайдемо вираз для цієї роботи $A_2 = -\frac{\Delta l m l \omega^2 \alpha_{cp}^2}{2}$. Повна енергія буде складати $A = A_1 + A_2 = -\Delta l mg + \left(\frac{mg \alpha_{cp}^2}{4} - \frac{m l \omega^2 \alpha_{cp}^2}{2}\right) \Delta l$. В одержаному виразі перша складова означає величину роботи з переміщення центру тяжіння маятника. Фізичний зміст другої складової вказує на роботу зі зміни енергії коливання. З теорії механічних коливань відомо, що $\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{g}{l}}$. Тоді вираз для визначення роботи, що йде на зміну енергії коливань набуде форми $\Delta E = \left(\frac{mg \alpha_{cp}^2}{4} - \frac{m l \omega^2 \alpha_{cp}^2}{2}\right) \Delta l = -\frac{mg \alpha_{cp}^2}{4} \Delta l$. Отже, маємо математичний вираз для знаходження роботи, що затрачена на зміну енергії коливань математичного маятника за визначених початкових умов. Якщо брати максимальне відхилення математичного маятника від положення рівноваги, то одержимо максимальне значення потенціальної енергії, яка рівна повній енергії (в цій точці кінетична енергія рівна нулю, бо швидкість руху маятника в крайній

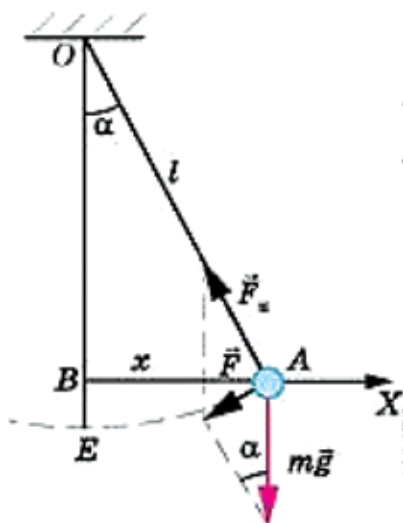


Рис. 1. Математичний маятник

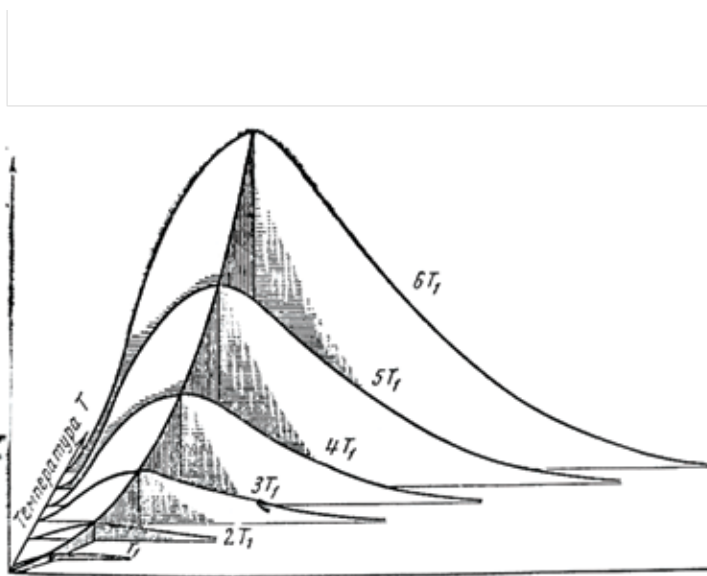


Рис. 2. Розподіл енергії у спектрі

точці рівна нулю). Таким чином, повна енергія буде рівна $E_{\text{ном}} = \frac{mgl\alpha_{\text{кр}}^2}{2}$.

Відношення приросту енергії коливань до повної енергії $\frac{\Delta E}{E} = -\frac{\Delta l}{2l}$. Звідси випливає, що коли змінюється довжина математичного маятника відповідна зміна частоти коливань визначається співвідношенням $\frac{\Delta \nu}{\nu} = -\frac{\Delta l}{2l} = \frac{\Delta E}{E}$, або $\frac{E}{\nu} = \frac{\Delta E}{\Delta \nu}$. Це означає, що $\frac{E}{\nu} = \text{const}$, або $E = \nu \cdot \text{const}$.

Таким чином, відношення повної енергії коливального руху математичного маятника до частоти коливання за малих амплітуд, коли повільно змінюється довжина маятника є величиною постійною.

Для різних маятників ця чисельна величина набуває своїх значень і залежить від початкових умов (довжини маятника, амплітуди).

Аналогічних результатів досягаємо у випадку фізичного маятника та для тіла, що обертається навколо своєї осі. Тоді можна зробити узагальнений висновок: відношення енергії коливання маятників різного роду до частоти їхніх коливань рівне певній константі.

Тепер розглянемо співвідношення енергії коливань та частоти в атомних системах. Г. Кіргоф відкрив закон співвідношення випромінювальної здатності будь-якого тіла та поглинальної здатності при заданих температурах і довжині хвилі $(\lambda, T) = \alpha(\lambda, T)$. Подальші дослідження привели вчених до висновку, що для опису законів випромінювання та поглинання, зокрема світла доцільно ввести поняття моделі ідеально випромінюваного тіла – абсолютно чорного тіла (АЧТ).

Прикладами таких моделей може бути закритий з усіх сторін непроникний для світла ящик із чорного паперу, металу, кераміки, в стінці яких зроблено один невеликий отвір (рис. 3).

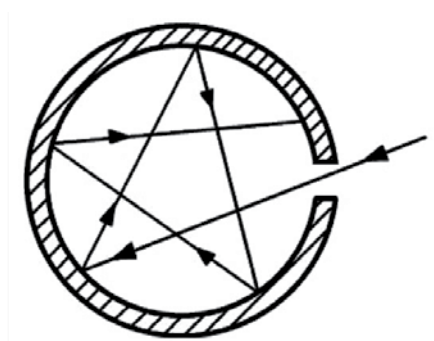


Рис. 3. Модель АЧТ

Промінь світла, що потрапив всередину ящика після багаторазового відбивання не має змоги вийти із нього. Для кожного матеріалу, з якого виготовлено ящик є обмеження у діапазоні температур: для паперу – до 150-200°C, для заліза – 1000-1400°C, для кераміки – до 3000°C.

На рисунку показано тримірні графіки спектрів випромінювання АЧТ за різних температур (рис. 2) із площинами перетинів. На горизонтальній осі відкладаються значення частоти енергії випромінювання, вертикальна вісь фіксує значення енергії випромінювання, за віссю перпендикулярною до частоти (горизонтальна площина) відкладаються значення температури тіла. Положення максимуму лінійно зміщується в область більш високих частот із зростанням температури.

Електромагнітна теорія Максвелла ґрунтовно теоретично пояснила процеси випромінювання, поглинання та поширення електромагнітних хвиль.

Над проблемою спектрів випромінювання та поглинання електромагнітних хвиль АЧТ виходячи з термодинамічних уявлень працювали десятки вчених, в тому числі й М. Планк. На основі узагальнення великого масиву експериментальних даних, електромагнітної теорії Максвелла й термодинаміки Л. Больцмана, праць Г. Кіргофа, Ж. Релея та Д. Джінса М. Планк представив неперервний спектр АЧТ незалежний від роду речовини у вигляді елементарних електромагнітних осциляторів енергії (рис. 4) (Кучерук І., Дущенко В., 1991). В результаті він одержав формулу, яка добре описувала експериментальні графіки спектру випромінювання АЧТ $\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$, де ν – частота випромінювання, h – стала Планка,

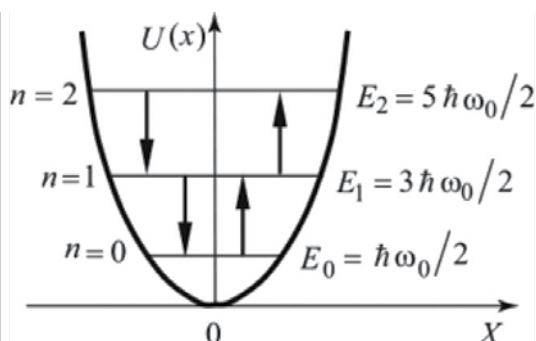


Рис. 4. Модель квантового осцилятора

k – стала Больцмана, T – абсолютна температура, c – швидкість світла. Добуток $h\nu$ має розмірність енергії і за змістом відповідає енергії коливань елементарного осцилятора для даної частоти. Випромінювання абсолютно чорного тіла є результатом того, що атоми-вібратори стали джерелами електромагнітних хвиль.

Експериментально побудовані графіки (рис. 2) в повній мірі відповідають функції розподілу енергії М. Планка за різних температур.

Як і у випадку з маятником у М. Планка також виникла проблема, що полягає у з'ясуванні зв'язку енергії та частоти. Аналогічно постала необхідність у введенні сталої, яка дістала назву кванта дії h . Тоді впливає ґрунтовна формула $E = h\nu$. У випадку математичного маятника мала місце подібна за формою функція $E = \nu \cdot \text{const}$. В обох випадках простежується зв'язок між енергією та частотою. Звідси можна зробити узагальнений висновок, що для атомних процесів зміна енергії відбувається порціями величиною $h\nu$, як і у випадку з маятником, де зміна енергії визначається через добуток константи на частоту – $\text{const} \cdot \nu$. Така закономірність є універсальною властивістю, яка не залежить від роду речовини. М. Планк обрахував величину h , яка складає значення $6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Зауважимо, що при виводі функції М. Планк АЧТ зобразив у вигляді множини елементарних електромагнітних осциляторів (атомів).

У приведених прикладах міститься доказова база сталості частот у спектрах. Універсальна стала для розмірів атомних систем має бути досить малою, бо в окремого атома енергія набагато менша за енергію макроскопічного тіла, яке складається з величезної кількості атомів. Звідси впливає, що для макротіла n набуває великого значення, що і є причиною того, що неможна спостерігати дискретності зміни енергії без зміни частоти коливань, так як таких індикаторів за нинішніх умов розвитку техніки не існує.

Із одержаного співвідношення М. Планка впливає висновок: так як відношення енергії коливань до частоти коливання маятника рівна певній сталій розмірності Дж·с, то для коливального маятника атомних розмірів ця величина може виявитися певною конкретною однаковою для всіх процесів.

Із гіпотези Планка, постулатів Бора, досліджень І. Тамма впливає, що енергія коливальних процесів атомних систем також набуває

значень згідно закономірності $E = nh\nu$, де n – ціле число, h – універсальна стала.

У Нобелівській промові М. Планк підкреслив, що при теоретичному обґрунтуванні встановленої ним формули він усвідомлював фундаментальність констант, що входять до неї: π , c , e , k , h . Універсальність одержаної функції розподілу енергії у спектрі випромінювання та поглинання АЧТ полягає й у тому, що за її допомогою М. Планк відразу визначив величину сталої Больцмана, вперше в науці теоретично визначив число Авогадро (1908), із об'єднаного закону електролізу, куди входить число Авогадро, теоретично визначив заряд електрона. Звідси впливає наступний фундаментальний висновок: *співпадіння числових значень вказаних фундаментальних констант встановлених теоретично та одержаних у результаті проведення множини дослідів свідчить про те, що фундаментальні константи використані М. Планком є фундаментальними особливостями оточуючого світу.*

Дослідження вчених в галузі випромінювання та поглинання електромагнітних хвиль, які узагальнив М. Планк привели також до висновку про реальність дискретності енергії в оточуючому середовищі, а тому виникла необхідність введення поняття про співвідношення перервного (дискретного) та неперервного в Природі. З часів теорії Максвелла й аж до гіпотези Планка про квант дії вважалося, що всі процеси в природі є неперервними. Починаючи з М. Планка суперечність, що виникла в подальшому вирішувалася через розвиток та впровадження в новітню теорію ідеї Л. де Бройля, а потім до створення нової теорії про будову та властивості речовини П. Дебаєм, Е. Шредінгером, Г. Гейзенбергером, П. Діраком, І. Таммом. У результаті виникла квантова механіка, яка дала вичерпну відповідь на проблему співвідношення дискретного та неперервного в Природі.

Висновки і перспективи подальших досліджень. У ході проведеного дослідження ми реалізували методологічний підхід виходячи із сучасних освітніх парадигм, що базуються на засадах наукових дослідження під час організації та проведення студентських досліджень в галузі природничих наук, технологій, професійної освіти, реалізації проектів на прикладі розгляду проблеми співвідношення енергії та частоти коливань макро- та мікро збуджених систем. Проблема, що розглядається має перспективу в подальшому моделюванні з використанням комп'ютерного програмування.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Єріна А.М., Захожай В.Б., Єрін Д.Л. *Методологія наукових досліджень: навч. посібн.* К.: Центр учбової літератури, 2004. 212 с.
2. Кучерук І.М., Душенко В.П. *Загальна фізика. Оптика. Квантова фізика: навч. посібн.* К.: Вища шк., 1991. 463 с.
3. *Методичні рекомендації до підготовки курсових і дипломних (кваліфікаційних) робіт: для студентів спеціальності 015 Професійна освіта (за спеціалізаціями) I (бакалаврського) рівня вищої освіти.* [укл.: О.В. Абрамова, Т.В. Куценко, М.І. Садовий, Д.В. Соменко, О.М. Трифонова]. Заг. ред. М.І. Садового. Кропивницький: РВВ ЦДПУ ім. В. Винниченка, 2020. 76 с.
4. *Методологія наукових досліджень у галузі: практикум: навч. посіб. для студ. спеціальності 151 «Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» / уклад.: Н.І. Буряу, В.С. Антонюк, Д.О. Півторак.* КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. 58 с.
5. Романчиков В.І. *Основи наукових досліджень: навч. посібн.* К.: Центр учбової літератури, 2007. 254 с.
6. Садовий М.І., Трифонова О.М., Хомутенко М.В. *Методика формування уявлень про сучасну наукову картину світу в хмаро орієнтованому навчальному середовищі. Вісник Черкаського національного університету. Серія: Педагогічні науки.* 2016. Вип. 7. С. 8–16.
7. *Сталий розвиток – Науковий дебют 2013 / наук. ред.: А. Кузьмінський, Х. Кретецький, С. Давидзюк.* Warszawa, WSM, 2014. 352 с.
8. Стюпін А.О. *Синергетичні виміри розвитку України: історія і сучасність.* Одеса: Астропринт, 2006. 156 с.
9. Трифонова О.М., Садовий М.І. *Інформаційні технології в наукових дослідженнях. Педагогічні науки.* Херсон, 2022. Вип. 98. С. 27–34.
10. Цехмістрова Г.С. *Основи наукових досліджень: навч. посібн.* К.: Вид. Дім «Слово», 2004. 240 с.
11. Шейко В.М., Кушнарєнко Н.М. *Організація та методика науково-дослідницької діяльності: підручн.* 2-ге вид. К.: Знання-Прес, 2002. 295 с.
12. Юринєць В.Є. *Методологія наукових досліджень: навч. посібник.* Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2011. 178 с.
13. Gharajedaghi J. *Systems Thinking: Managing Chaos and Complexity: A Platform for Designing Business Architecture.* URL: [https://ccsuniversity.ac.in/bridge-library/magazine/Systems%20Thinking,%20_%20Managing%20Chaos%20and%20Complexity_%20A%20Platform%20for%20Designing%20Business%20Architecture%20\(%20PDFDrive.com%20\).pdf](https://ccsuniversity.ac.in/bridge-library/magazine/Systems%20Thinking,%20_%20Managing%20Chaos%20and%20Complexity_%20A%20Platform%20for%20Designing%20Business%20Architecture%20(%20PDFDrive.com%20).pdf) (дата звернення: 14.09.2022).

REFERENCES:

1. Yerina, A.M., Zakhzhay, V.B., Yerin, D.L. (2004) *Metodolohiya naukovykh doslidzhen [Methodology of scientific research]: navch. posibn.* K.: Tsentri uchbovoyi literatury [in Ukrainian].
2. Kucheruk, I.M., Dushchenko, V.P. (1991) *Zahal'na fizyka. Optyka. Kvantova fizyka [General Physics. Optics. Quantum physics]: navch. posibn.* K.: Vyshcha shk. [in Ukrainian].
3. Abramova, O.V., Kutsenko, T.V., Sadovyi, M.I., Somenko, D.V., Tryfonova, O.M. (2020) *Metodychni rekomendatsiyi do pidhotovky kursovykh i dyploornykh (kvalifikatsiynykh) robit: dlya studentiv spetsial'nosti 015 Profesiynna osvita (za spetsializatsiyamy) persho (bakalavr's'koho) rivnya vyshchoyi osvity [Methodological recommendations for the preparation of course and diploma (qualification) works: for students of specialty 015 Professional education (by specialization) of the first (bachelor) level of higher education].* Kropyvnyts'kyi: RVV TSDPU im. V. Vynnychenka [in Ukrainian].
4. Buraui, N.I., Antonyuk, V.S., Pivtorak, D.O. (2021) *Metodolohiya naukovykh doslidzhen' u haluzi: praktykum [Methodology of scientific research in the field]: navch. posib. dlya stud. spetsial'nosti 151 «Avtomatyzatsiya ta komp'yuterno-intehrovani tekhnolohiyi».* K.: KPI im. Ihorya Sikors'koho [in Ukrainian].
5. Romanchukov, V.I. (2007) *Osnovy naukovykh doslidzhen' [Basics of scientific research]: navch. posibn.* K.: Tsentri uchbovoyi literatury [in Ukrainian].
6. Sadovyi, M.I., Tryfonova, O.M., Khomutenko, M.V. (2016) *Metodyka formuvannya uyavlen' pro suchasnu naukovu kartynu svitu v khmaro oriyentovanomu navchal'nomu seredovyschi [The method of forming ideas about the modern scientific picture of the world in a cloud-oriented educational environment].* *Visnyk Cherkas'koho natsional'noho universytetu. Seriya: Pedagogichni nauky.* 7. 8–16 [in Ukrainian].
7. Kuz'mins'kyi, A., Kretsek, K.H., Davydzjuk, S. (2014) *Stalyi rozvytok – Naukovyy debyut 2013 [Sustainable development – Scientific debut 2013].* Warszawa, WSM [in Ukrainian].
8. St'opin, A.O. (2006) *Synerhetychni vymiry rozvytku Ukrayiny: istoriya i suchasnist' [Synergistic dimensions of the development of Ukraine: history and modernity].* Odessa: Astroprynt [in Ukrainian].
9. Tryfonova, O.M., Sadovyi, M.I. (2022). *Informatsiyni tekhnolohiyi v naukovykh doslidzhennyakh [Information technologies in scientific research].* *Pedahohichni nauky.* 98. 27–34 [in Ukrainian].
10. Tsekhmistrova, H.S. (2004) *Osnovy naukovykh doslidzhen' [Basics of scientific research] navch. posibn.* K.: Vyd. Dim «Slovo» [in Ukrainian].

11. Sheyko, V.M., Kushnarenko, N.M. (2002) *Orhanizatsiya ta metodyka naukovo-doslidnyts'koyi diyal'nosti [Organization and methodology of scientific research activity]: pidruchn.* К.: Znannya-Pres [in Ukrainian].
12. Yurynets', V.YE. (2011) *Metodolohiya naukovykh doslidzhen' [Methodology of scientific research]: navch. posibnyk.* L'viv : LNU imeni Ivana Franka [in Ukrainian].
13. Gharajedaghi J. Systems Thinking: Managing Chaos and Complexity: A Platform for Designing Business Architecture. URL: [https://ccsuniversity.ac.in/bridge-library/magazine/Systems%20Thinking,%20_%20Managing%20Chaos%20and%20Complexity_%20A%20Platform%20for%20Designing%20Business%20Architecture%20\(%20PDFDrive.com%20\).pdf](https://ccsuniversity.ac.in/bridge-library/magazine/Systems%20Thinking,%20_%20Managing%20Chaos%20and%20Complexity_%20A%20Platform%20for%20Designing%20Business%20Architecture%20(%20PDFDrive.com%20).pdf) (data zvernennia: 14.09.2022) [in English].

УДК 538.9

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-6>**Людмила СОЛЯНИК**

кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник, Інститут колоїдної хімії та хімії води імені А.В. Думанського Національної академії наук України, Вернадського Академіка бул, 42, м. Київ, Україна, 03142

ORCID ID: 0000-0002-2661-9392

SCOPUS-AUTHOR ID: 36903008700

Бібліографічний опис статті: Соляник, Л. (2022). Реакції електронного переносу на міжфазовій межі поверхня твердого тіла-розтоп при синтезі наноматеріалів в умовах катіонного каталізу. *Фізика та освітні технології*, 2, 39–43. doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-6>

РЕАКЦІЇ ЕЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСУ НА МІЖФАЗОВІЙ МЕЖІ ПОВЕРХНЯ ТВЕРДОГО ТІЛА-РОЗТОП ПРИ СИНТЕЗІ НАНОМАТЕРІАЛІВ В УМОВАХ КАТІОННОГО КАТАЛІЗУ¹

З метою зіставлення експериментальних і теоретично одержаних характеристик проведено аналіз дослідження взаємодії поверхні алмаза з карбонат- і борвмісними розтопами. Показано, що рівень Фермі на поверхні чистого кристала алмаза розташований ближче до межі зони провідності, при цьому чистий алмаз поводить себе як класичний діелектрик.

Встановлено, що адсорбція діоксиду вуглецю на поверхні алмаза приводить до значної поляризації кластера поверхні у бік зони провідності. Ширина забороненої зони змінюється, але діелектричний характер кластера не змінюється, не відбувається перекривання зон, тобто алмаз не набуває напівпровідникового й напівметалевого характеру провідності. В той час адсорбція VO_2^- на поверхні алмаза приводить до сильної поляризації кластера поверхні у бік валентної зони. При цьому ширина забороненої зони незначно змінюється, менше ніж у випадку діоксиду вуглецю. Таким чином, присутність VO_2^- також не приводить до виникнення напівпровідникового характеру провідності. Запропоновано умови виникнення окиснювально-відновлювальних процесів на межі поділу електрод/сольовий розтоп, де відбувається адсорбція іонів розтопу, що приводить до появи значних наведених дипольних моментів у частинок адсорбата через перерозподіл електронної густини між адсорбентом й адсорбатом. У результаті такого перерозподілу змінюється положення рівня Фермі, і, як наслідок, воно наближається до дна зони провідності (або до межі валентної зони), що приводить до переходу поверхневого шару діелектрика у провідний стан. Зміна катіон-аніонного складу розтопу дозволяє керувати швидкістю окиснювально-відновних реакцій на межі діелектрик/розтоп. Очевидно, це й приводить до того, що у деяких розтопах діелектрик починає проявляти електродну функцію, і, як наслідок, виступає в ролі активної підкладки при високотемпературному електрохімічному синтезі. Проведено розрахунок катодного струму обміну при одноелектронному перенесенні заряду крізь зону провідності твердого тіла із застосуванням обраної моделі залежності густини електронних рівнів від енергії.

Ключові слова. Окислювально-відновні реакції, електрод, діелектрик, напівпровідник.

Ludmila SOLYANIK

PhD in Chemistry, Senior Researcher, A. V. Dumansky Institute of Colloid and Water Chemistry, 42 Vernadsky Academician Avenue, Kyiv, 03142, Ukraine

ORCID ID: 0000-0002-2661-9392

SCOPUS-AUTHOR ID: 36903008700

To cite this article: Solyanik, L. (2022). Reaktsii elektronnoho perenosu na mizhfazovii mezhi poverkhnia tverdoho tila-roztop pry syntezi nanomaterialiv v umovakh kationnoho katalizu [Electron transfer reactions at the interphase boundary of the surface of a solid-melting during the synthesis of nanomaterials under the conditions of cationic catalysis]. *Physics and Educational Technology*, 2, 39–43, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-6>

ELECTRON TRANSFER REACTIONS AT THE INTERPHASE BOUNDARY OF THE SURFACE OF A SOLID-MELTING DURING THE SYNTHESIS OF NANOMATERIALS UNDER THE CONDITIONS OF CATIONIC CATALYSIS

In order to compare the experimental and theoretically obtained characteristics, an analysis of the interaction of the diamond surface with carbonate- and boron-containing melts was carried out. It is shown that the Fermi level

¹ Висловлюю подяку к.ф.-м.н. С.С. Коваленку за обговорення отриманих результатів

on the surface of a pure diamond crystal is located closer to the boundary of the conduction band, while pure diamond behaves like a classical dielectric.

It was established that the adsorption of carbon dioxide on the diamond surface leads to a significant polarization of the surface cluster to the side of the conduction zone. The width of the band gap decreases, but the dielectric character of the cluster does not change, there is no overlapping of zones, that is, the diamond does not acquire the semiconducting and semimetallic character of conductivity. At that time, the adsorption of BO_2^- on the diamond surface leads to a strong polarization of the surface cluster towards the valence band. At the same time, the width of the band gap decreases slightly, less than in the case of carbon dioxide. Thus, the presence of BO_2^- also does not lead to the semiconducting nature of conductivity. The conditions for the occurrence of oxidation-reduction processes at the interface of the electrode/salt melt, where the adsorption of melt ions occurs, are proposed, which leads to the appearance of significant induced dipole moments in the adsorbate particles due to the redistribution of electron density between the adsorbent and the adsorbate. As a result of such redistribution, the position of the Fermi level changes and, as a result, it approaches the bottom of the conduction band (or the border of the valence band), which leads to the transition of the surface layer of the dielectric to the conductive state. Changing the cation-anion composition of the melt allows you to control the rate of redox reactions at the dielectric/melt interface. Obviously, this leads to the fact that in some melts the dielectric begins to exhibit an electrode function and, as a result, acts as an active substrate in high-temperature electrochemical synthesis. The calculation of the cathodic exchange current during one-electron charge transfer through the conduction zone of a solid was carried out using the chosen model of the dependence of the density of electron levels on the energy.

Key words: Redox reactions, electrode, dielectric, semiconductor.

Актуальність проблеми. Квантово-механічною теорією елементарного акту переносу заряду через межу метал (провідник) – електроліт (Кришталик, 1979) пояснюється як наявність струмів обміну, так і сам механізм red|ox реакцій у гетерогенних середовищах. Так як сам процес можливого переходу електронів з поверхні катода (діелектрика) до частинки електроліту найбільш ймовірний при вирівнюванні рівнів енергії Фермі матеріалу катода й енергій НВМО в ЕАК, для оцінки можливості виникнення поверхневої провідності були виконані квантовохімічні розрахунки, що повинні моделювати перехід кластера алмаза у квазіметалевий стан у присутності характерних частинок іонних розтопів.

Аналіз останніх досліджень і публікацій.

Експериментально виявлена (Соловійов, 2004) можливість осадження на природні й синтетичні алмази-діелектрики гальванічних покриттів без попереднього утворення провідного шару свідчила про виникнення провідності алмазу, зануреного в карбонатомісний розтоп і відсутності провідності, наприклад, у розтопі зі вмістом боридів. На підставі експериментальних даних авторами (Соловійов, 2004, Шаповал, 1995) був зроблений феноменологічний висновок про те, що поверхнева провідність алмаза в оксидних розтопах обумовлена перебігом окислювально-відновних процесів на міжфазній межі. Пізніше була запропонована (на підставі аналізу результатів квантовохімічних розрахунків) модельна схема зміни поверхневої провідності алмаза, що пояснює виникнення провідності поверхневого шару алмаза-діелек-

трика (Шаповал, 1995). Однак дотепер питання про тип та механізм виникнення поверхневої провідності в цьому випадку є дискусійним.

Основні результати. В якості об'єктів дослідження був обраний: кластер $\text{C}_{70}\text{H}_{24}$, як структурні частинки розтопу для моделювання стадії переносу заряду при відновленні ЕАК та одержання карбідів і боридів вольфраму – ізоелектронні молекули CO_2 і VO_2^- , а також аніон $[\text{WO}_4]^{2-}$ в оточенні в першій зовнішній координаційній сфері 2-х однозарядних катіонів одного сорту Ca^{2+} чи Mg^{2+} або ж чотирьох однозарядних катіонів Li^+ .

Оскільки реакційну здатність молекул у рамках методу СУП МО ЛКАО відповідно до теорії Фукуї пов'язують зі значеннями ВЗМО й НВМО взаємодіючих молекул, доповнюючи аналіз величинами енергетичного зазору $\Delta = E_{\text{ВЗМО}} - E_{\text{НВМО}}$, була проведена квантовохімічна оцінка цих параметрів, для подальшого порівняння їх з енергіями Фермі, як величин, пропорційних енергіям Фермі з точністю до співмножника для альтернативних взаємодій: $\text{C}_{70}\text{H}_{24} \dots \text{CO}_2$ і $\text{C}_{70}\text{H}_{24} \dots \text{VO}_2^-$ у присутності частинок $\{\text{M}_n^{m+}[\text{WO}_4]^{2-}\}^{(nm-2)+}$, де $\text{M} = \text{Li}^+, \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$.

Проведений аналіз такого моделювання показав (рис.1), що присутність частинок CO_2 і VO_2^- поблизу поверхні кластера $\text{C}_{70}\text{H}_{24}$, по-перше, не створює принципового впливу на величини ВЗМО кластера $\text{C}_{70}\text{H}_{24}$. По-друге, залучення аніонів $[\text{WO}_4]^{2-}$ приводить до несуттєвого збільшення значень ВЗМО кластера, більшого, природно, у випадку з VO_2^- . Нарешті, залучення до розгляду ЕАК $\{\text{M}_n^{m+}[\text{WO}_4]^{2-}\}^{(nm-2)+}$ (рис.1), навпаки, значно знижує величини

енергій ВЗМО (приблизно в 2 рази) на фоні несуттєвого зниження цих величин для кластерів у присутності VO_2^- . При цьому простежується тенденція зниження величин енергетичного зазору граничних МО значно більша, для карбонатних розтопів.

Зміна реакційної здатності поверхні алмазу при зміні катіонного складу розтопу відображає як специфіку хімічної взаємодії частинок у сольових розтопах, так і перебіг гетерогенних red/ox реакцій на поверхні діелектрика. Головна суть цього ефекту (переходу поверхневого шару діелектрика в провідний стан) викликана перерозподілом електронної густини між адсорбентом і адсорбатом, що призводить до відповідних змін величини енергії Фермі електронів поверхні електроду, а також і енергій граничних молекулярних орбіталей ЕАК. Очевидно, що доміантою цього ефекту є вирівнювання рівнів енергії Фермі матеріалу катода й енергій НВМО ЕАК.

Проведений аналіз дослідження (табл. 1) може пояснювати виникнення поверхневої

провідності алмаза (діелектрика), зануреного в карбонатвмісний розтоп, зміною реакційної здатності поверхні алмаза, стимульованої зміною катіонного складу розтопу (катіонний каталіз). Одержаний результат не суперечить запропонованій раніше модельній схемі виникнення поверхневої провідності (Соловйов, 2004), незважаючи на деякі розходження в розглянутих методах дослідження, а запропонована раніше схема, судячи із аналізу складу граничних МО, є частинним випадком запропонованої концепції.

Таблиця 1

Енергетичні характеристики кластера алмазу при взаємодії з частинками розтопу

Енергія, еВ	Валентна зона	Зона провідності	Ширина забороненої зони
Алмаз	4,91	1,31	6,20
Алмаз + CO_2	3,42	0,42	3,85
Алмаз + VO_2^-	0,40	5,05	5,45

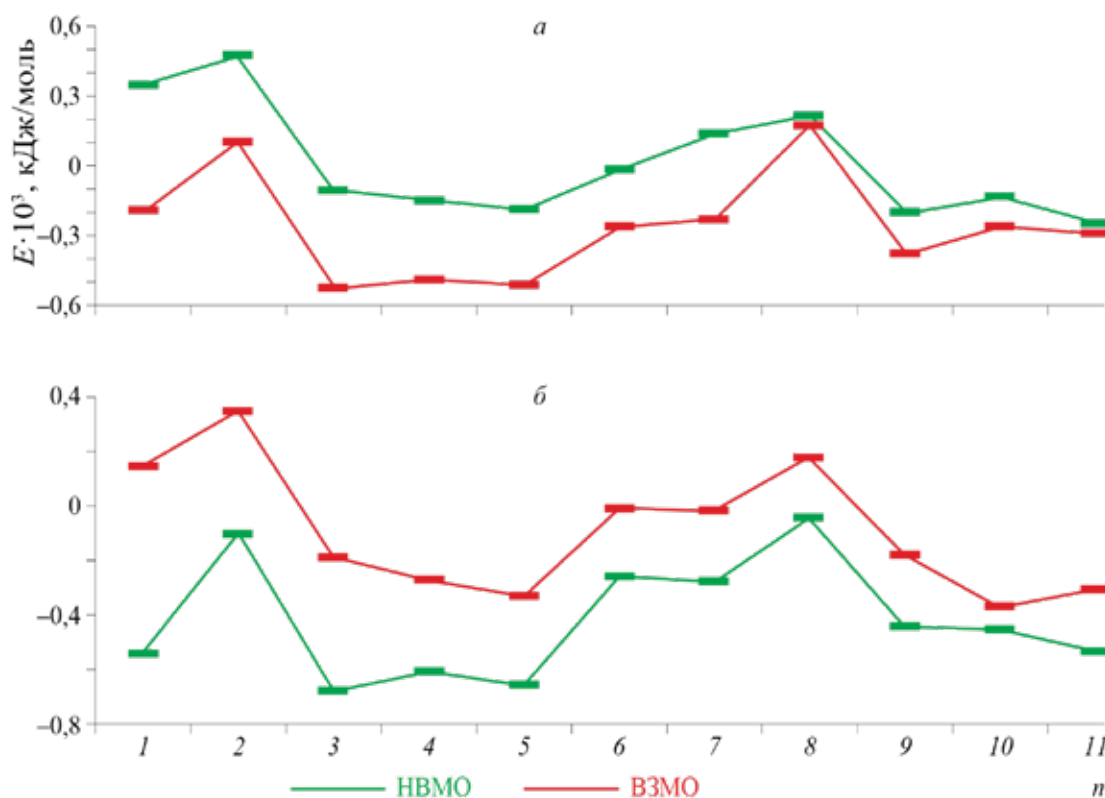


Рис. 1. Діаграма величин енергій ВЗНО і НВМО для взаємодій $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots\text{CO}_2$ і $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots\text{VO}_2^-$, у присутності частинок $\{\text{M}_n^{m+}[\text{WO}_4]^{2-(nm-2)+}\}$, де $\text{M}=\text{Li}^+, \text{Ca}^{2+}, \text{Mg}^{2+}$ у присутності а) VO_2^- б) CO_2 ¹

¹ Точки на діаграмах відповідають наступним взаємодіям: 1- VO_2^- чи CO_2 ; 2- CO_2 (або VO_2^-)... $[\text{WO}_4]^{2-}$; 3- CO_2 (або VO_2^-)... $\{\text{Li}^+[\text{WO}_4]^{2-}\}^{2+}$; 4- CO_2 (або VO_2^-)... $\{\text{Ca}^{2+}[\text{WO}_4]^{2-}\}^{2+}$; 5- CO_2 (або VO_2^-)... $\{\text{Mg}^{2+}[\text{WO}_4]^{2-}\}^{2+}$; 6- $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots$; 7- $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots \text{CO}_2$ (або VO_2^-); 8- $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots \text{CO}_2$ (або VO_2^-)... $[\text{WO}_4]^{2-}$; 9- $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots \text{CO}_2$ (або VO_2^-)... $\{\text{Li}^+[\text{WO}_4]^{2-}\}^{2+}$; 10- $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots \text{CO}_2$ (або VO_2^-)... $\{\text{Ca}^{2+}[\text{WO}_4]^{2-}\}^{2+}$; 11- $\text{C}_{70}\text{H}_{24}\dots \text{CO}_2$ (або VO_2^-)... $\{\text{Mg}^{2+}[\text{WO}_4]^{2-}\}^{2+}$

Таблиця 2

Порівняння теоретичних й експериментальних результатів

Теорія + квантовохімічний розрахунок	Експеримент [18 – 21]
Відстань від рівня Фермі до краю зони провідності – 1,31 еВ.	Стандартний потенціал алмазного електрода – (1,32 – 1,38) В.
Відстань від рівня Фермі до краю зони провідності в кластері з адсорбованим карбонат-іоном – 0,42 еВ.	Стандартний потенціал алмазного електрода в присутності CO ₂ – (0,40 – 0,45) В.
Зовнішня катодна напруга 0,4В приводить до практичного збігу рівня Фермі й мінімуму зони провідності в кластері.	Катодна напруга на алмазі в точці відновного процесу – 0,4 В.
Зовнішня катодна напруга – 0,6 В приводить до занурення рівня Фермі в кластері в зону провідності на 2 kT. Кластер починає набувати структури класичного металу.	Катодна напруга на алмазі в точці максимуму відновного процесу – 0,6 В.

Зупинимося детально на випадку розтопу із вмістом карбонатів (табл. 1). Температура такого розтопу ≈ 1100 К. Для такої температури $kT \approx 0,095$ еВ. Таким чином, відстань від рівня Фермі до межі зони провідності в присутності CO₂ становить $\approx 4,5$ kT, що фактично є межею переходу кластера з невідродженого стану в слабковироджений. Цю відстань легко зменшити, якщо прикласти до алмаза катодну напругу. При цьому можуть бути такі випадки:

- значення зовнішнього електричного поля $v - (0,4 - 0,45)$ В. Рівень Фермі в кластері перебуває в безпосередній близькості від межі зони провідності. Кластер починає проявляти металеві властивості.

- значення зовнішнього електричного поля $v - 0,8$ В. Рівень Фермі поринає в зону провідності на 4 kT. Енергетична структура кластера відповідає структурі класичного металу. Такий кластер поводить себе як метал, тобто стає електропровідним (електронна провідність);

- значення зовнішнього електричного поля $v - 0,9$ В. Рівень Фермі на всій поверхні алмаза наближається до межі зони провідності на відстань в 4 kT, внаслідок чого електронний газ на всій поверхні переходить у вироджений стан.

Таким чином, для переведення кластера алмаза у квазіметалевий стан у присутності CO₂ досить прикласти до алмаза катодну напругу – (0,4 – 0,45) В.

Аналіз даних експериментальних результатів (Соловйов, 2014) показує (табл. 2), що відновний процес на алмазі в присутності CO₂ відбувається при катодній перенапрузі в – (0,4 – 0,6) В. Відповідно до теоретичного аналізу такі катодні напруги приводять до переходу кластера алмаза до квазіметалевого стану, коли рівень Фермі перебуває в безпосередній близькості від межі зони провідності.

Висновки. Аналіз проведеного моделювання гетерогенних реакцій електрод(діелектрик)/розтоп на прикладі вивчення взаємодій кластеру алмазу та ізоелектронних структурних частинок розтопу CO₂ і VO₂⁻ показав, що тільки додаткове залучення частинок {M_n^{m+}[WO₄]²⁻}^{(nm-2)+} призводить до суттєвого зниження величин енергій ВЗМО кластера в присутності CO₂ на фоні незначної зміни таких у присутності VO₂⁻. Це корелює з аналітично розрахованими нами значеннями величин струмів обміну, відмінних від нуля, і пояснює виникнення поверхневої провідності алмаза, зануреного у відповідний іонний розтоп, зміною реакційної здатності поверхні алмазу при зміні катіонного складу розтопу, що відображає як суто хімічні взаємодії частинок у сольових розтопах, так і перебіг гетерогенних red|ox реакцій на поверхні твердого тіла. Головна суть цього ефекту (переходу поверхневого шару діелектрика в провідний стан) викликана перерозподілом електронної густини між адсорбентом і адсорбатом, що призводить як до зміни величини енергії електронів на рівні Фермі поверхні електрода так і енергій узагальнених молекулярних орбіталей ЕАК.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Кришталік Л.И. Электродные реакции. Механизм элементарного акта. М.: Наука, 1979. 113 с.
2. Соловьев В.В., Малышев В.В., Габ А.И. Физико-химические процессы на межфазной границе диэлектрик – оксидный расплав и их использование для гальванической обработки алмазных порошков *Теоретические основы химической технологии*. 2004. Т. 38. № 2. С. 219.
3. Шаповал В.И., Соловьев В.В., Давиденко Л.П. Возникновение поверхностной проводимости алмаза в ионных расплавах. *Украинский химический журнал*. 1995. Т. 61. С. 3-8.
4. Соловьёв В. В., Черненко Л. А. Квантово–механическое моделирование электронной структуры и состава металлокомплексов вольфрама, адсорбированных на поверхности электрода при высокотемператур-

ном электрохимическом синтезе в условиях катионного катализа. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*. 2014. 12(1). С. 45-55.

REFERENCES:

1. Krishtalik L.I. (1979) *Electrode reactions. The mechanism of the elementary act*. М.: Nauka. 113 p. [in Russian].
2. Soloviev V.V., Malyshev V.V., Gab A.I. (2004) Physico-chemical processes at the dielectric-oxide melt interface and their use for galvanic treatment of diamond powders. *Theoretical foundations of chemical technology*. V. 38. No. 2. P. 219. [in Russian].
3. Shapoval V.I., Soloviev V.V., Davidenko L.P. (1995) The emergence of surface conductivity of diamond in ionic melts. *Ukrainian chemical journal*. Т. 61. С. 3-8.
4. Solovyov VV, Chernenko LA. (2014) Quantum-mechanical modeling of the electronic structure and composition of tungsten metal complexes adsorbed on the electrode surface during high-temperature electrochemical synthesis under cationic catalysis. *Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies*. 12(1). pp. 45-55. [in Russian].

UDC 535.326:539.05:539.1.074.4:621.385.6

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-7>

Petro TROKHIMCHUCK

Ph.D., Associate Professor Associate Professor at Department of A.V. Svidzynskiy's Theoretical and Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0003-2737-0506

SCOPUS-AUTHOR ID: 8383601100

To cite this article: Trokhimchuck, P. (2022). Do pytannia pro pryrodu ta modeliuvannia optychno-indukovanoho cherenkovskoho vyprominiuvannia [To question about nature and modeling the optical-induced Cherenkov radiation]. *Physics and Education Technology*, 2, 44–53. doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-7>

TO QUESTION ABOUT NATURE AND MODELLING THE OPTICAL-INDUCED CHERENKOV RADIATION

The main problems of nature the optical-induced Cherenkov radiation are discussed. We show that this problem are connected with problem of shock excitation of heterogeneous polarization the irradiated matter. With this point of view the Cherenkov radiation is Nonlinear Optical (NLO) phenomenon. But classical NLO effects are phenomena with homogeneous shock-excited polarization. Two aspects of modeling this phenomenon are observed. First, microscopic, is based on synthesis A. Bohr theory of representation the Cherenkov radiation on the basis the scattering charge particles in media. This theory gives hyperboloid of the shape of the particle's braking track in the medium. Generating cones of Cherenkov radiation are formed by external normals to the A. Bohr hyperboloid. Second, macroscopic is based on I. Golub model of formal analogy Snell law and Cherenkov radiation. Cherenkov speed is determined as speed of shock nonlinear polarization of irradiated matter. Synthesis A. Bohr and I. Golub models allow to determine the product of nonlinear laser-induced refraction index and speed of nonlinear polarization. The essential difference between optically induced and classical (obtained by gamma quanta or charged particles) Cherenkov radiation lies in the radiation distribution spectrum. The classical spectrum is more homogeneous, since each particle "has" its own hyperboloid. For the optical case, we have the number of cones, which is related to the mode structure of laser radiation. So for the TEM₀₀ fashion we have only one cone. That is why the radiation spectrum will be more heterogeneous, as in the classic case: ultraviolet radiation will be in the central part, and infrared radiation will be at the edges. The observation of laser-induced Cherenkov radiation is connected with problem of diffraction stratification and known as surface continuum radiation.

Key words: Cherenkov radiation, A. Bohr model, I. Golub model, optical breakdown, Relaxen Optics, cascade processes, shock processes, 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, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0003-2737-0506

SCOPUS-AUTHOR ID: 8383601100

Бібліографічний опис статті: Трохимчук, П. (2022). До питання про природу та моделювання оптично-індукованого черенковського випромінювання. *Фізика та освітні технології*, 2, 44–53, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-7>

ДО ПИТАННЯ ПРО ПРИРОДУ ТА МОДЕЛЮВАННЯ ОПТИЧНО-ІНДУКОВАНОГО ЧЕРЕНКОВСЬКОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

Обговорюються основні проблеми природи оптично-індукованого черенковського випромінювання. Показано, що ця проблема пов'язана з проблемою ударного збудження неоднорідної поляризації опроміненої речовини. З цієї точки зору випромінювання Черенкова є нелінійним оптичним явищем. Але класичні ефекти нелінійної оптики – це явища з однорідною ударно-збуджуваною поляризацією. Спостерігаються два аспекти моделювання цього явища. Перший, мікроскопічний, заснований на теорії О. Бора представлення черенковського випромінювання на основі розсіювання заряджених частинок у середовищах. Ця теорія дає вигляд форми гальмівного шляху частинки в середовищі у вигляді гіперолоїда. Твірні конуси черенковського випромінювання утворені зовнішніми нормальними до гіперолоїда

О. Бора. По-друге, макроскопічний базується на моделі І. Голуба формальної аналогії закону Снелла та Черенковського випромінювання. Черенковська швидкість визначається як швидкість ударної нелінійної поляризації опроміненої речовини. Синтез моделей О. Бора та І. Голуба дозволяє визначити добуток нелінійного лазерно-індукованого показника заломлення на швидкість нелінійної поляризації. Істотна відмінність оптично індукованого від класичного (отриманого гамма-квантами або зарядженими частинками) черенковського випромінювання полягає в спектрі розподілу випромінювання. Класичний спектр більш однорідний, оскільки кожна частка «має» свій гіперболіод. Для оптичного випадку ми маємо кількість конусів, яка пов'язана з модовою структурою лазерного випромінювання. Отже, для моди TEM_{00} ми маємо лише один конус. Тому спектр випромінювання буде більш неоднорідним, як і в класичному випадку: ультрафіолетове випромінювання буде в центральній частині, а інфрачервоне – по краях. Спостереження лазерно-індукованого черенковського випромінювання пов'язане з проблемою дифракційного розширення і відомо як поверхневе континуальне випромінювання.

Ключові слова: черенковське випромінювання, модель О. Бора, модель І. Голуба, оптичний пробій, релаксаційна оптика, каскадні процеси, ударні процеси, моделювання.

Introduction

Cherenkov radiation (Vavilov–Cherenkov effect) is electromagnetic radiation emitted when a charged particle (such as an electron) passes through a dielectric medium at a speed greater than the phase velocity (speed of propagation of a wavefront in a medium) of light in that medium (Bohr A., 1950; Frank, 1988; Golub, 1990; Jelly, 1958; Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). A classic example of Cherenkov radiation is the characteristic blue glow of an underwater nuclear reactor. Its cause is similar to the cause of a sonic boom, the sharp sound heard when faster-than-sound movement occurs. The phenomenon is named after Soviet physicist Pavel Cherenkov (Frank, 1988; Jelly, 1958).

But Cherenkov radiation may be represented as Nonlinear Optical phenomenon two (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). Therefore, we must researched this effect in more widely sense as radiational relaxation of shock nonlinear excited heterogeneous polarization. This determination is more widely as traditional. It conclude various ways of excited this polarization, including laser irradiation.

The main problems of nature the optical-induced Cherenkov radiation are discussed. We show that this problem are connected with problem of shock excitation if heterogeneous polarization the irradiated matter. With this point of view the Cherenkov radiation is Nonlinear Optical (NLO) phenomenon (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). But classical NLO effects are phenomena with homogeneous shock-excited polarization. Two aspects of modeling this phenomenon are observed. First, microscopic, is based on synthesis A. Bohr theory of representation the Cherenkov radiation on the basis the scattering charge particles in media. This theory gives hyperboloid of the shape of the particle's braking track in the medium. Generating

cones of Cherenkov radiation are formed by external normals to the A. Bohr hyperboloid (Bohr A., 1950). Second, macroscopic is based on I. Golub model of formal analogy Snell law and Cherenkov radiation. Cherenkov speed is determined as speed of shock nonlinear polarization of irradiated matter. Synthesis A. Bohr and I. Golub models allow to determine the product of nonlinear laser-induced refraction index and speed of nonlinear polarization (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). The essential difference between optically induced and classical (obtained by gamma quanta or charged particles) Cherenkov radiation lies in the radiation distribution spectrum. The classical spectrum is more homogeneous, since each particle "has" its own hyperboloid. For the optical case, we have the number of cones, which is related to the mode structure of laser radiation. So for the TEM_{00} fashion we have only one cone. That is why the radiation spectrum will be more heterogeneous, as in the classic case: ultraviolet radiation will be in the central part, and infrared radiation will be at the edges. The observation of laser-induced Cherenkov radiation is connected with problem of diffraction stratification and known as surface continuum radiation (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022).

Problems of the observation the Cherenkov radiation and shock processes in matter as Nonlinear (NLO) and Relaxed (RO) Optical processes are connected with acoustic (thermal) and electromagnetic (plasma and Nonlinear optical) nature (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). These processes may be connected with diffractive stratification of laser beam, including self-focusing, self-trapping, and after this generation of supercontinuum radiation (ordered – Cherenkov radiation, and disorder – plasma radiation) (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022).

Concepts, modeling and discussions

On Fig. 1 experimental data, which are received for sodium containing heat-pipe with 20 cm active length and a H_{ansh}-type 10 kW peak dye laser, are represented. The sodium density was $10^{14} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. The beam of 0,5 cm^{-1} bandwidth laser was focused by a lens into the sodium cell after special filtering. The laser intensity at the focus was 10 MW/cm^2 and is sufficient for the formation of self-trapped filaments. The forward emission was photographed by an Alphax B216 camera with f/number of 1,9, placed after the sodium cell without any imaging optics (Golub, 1986). The laser beam was blocked with small on axis disc to prevent over-expose.

The spectral and angular properties of the conical radiation are well-known (Golub, 1986). The cone angle is $1^\circ - 3^\circ$ and increases as the laser frequency approaches the atomic transition and with increasing sodium density. The cone spectrum is broad ($5 - 10 \text{ cm}^{-1}$) and is to the red of the transition. For small laser detuning ($5 - 10 \text{ cm}^{-1}$) the peak of conic emission is detuning. For large laser detuning ($6 - 20 \text{ cm}^{-1}$) the peak detuning exhibits saturation behavior; the limiting value is at the dispersionless point – 589,4 nm (Golub, 1986).

Two kinds of experiments were performed to establish the surface character of the conical emission. The light changes polarization of initial beam in a linear case, with a direction determines the difference of right and left polarizations. Self-

trapping of laser light close to the transition is due to saturation effects, and this change in polarization is expected to occur inside the filaments, where saturation degree is maximum. In (Golub, 1986) next conclusion was made: conical radiation is generated at a nonsaturated region such as self-trapped filament surface.

The question about spatial coherence of conical radiation was observed in (Golub, 1986). It was found that the angular and spectral distribution of the conical radiation is independent of lens type. The next conclusion was made the conical radiation from various filaments add up incoherently and display no interference pattern.

The data of laser irradiated different 1 – 10 cm – long cells containing H₂O or D₂O are represented in Fig. 2 (Golub, 1990). In these experiments a Quantel YG-471 mode-locked laser was used, which produced 22-psec-duration pulses at 1,06 μm of up to 35 mJ energy or its second harmonic 15-psec-duration pulses of 12 mJ energy. A variety of lenses with focal lengths from 2 to 25 cm, capable of producing intensities in the focal spot of up to 10^{12} W/cm^2 . Several (usually 5 to 10) filaments were produced by each pulse/ It was easier to produce supercontinuum by focusing the laser beam with long-focal-length lenses into the long cells, and the threshold for supercontinuum in D₂O was lower than that in H₂O. The supercontinuum was spread in a circular rainbow, and for 1,06- μm excitation the generated photon energy increases with the off-

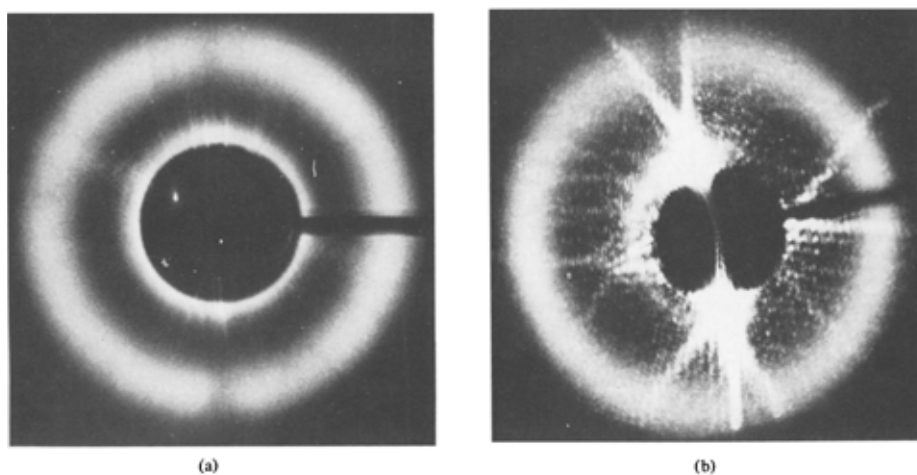


Fig. 1. The pattern of the conical radiation at sodium density $1,8 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ and laser detuning of 0,2 nm to the blue of the D₂ transition. The laser radiation is focused into the sodium cell bay a spherical lens (a) and by a cylindrical lens (b). The laser beam is blocked with a small of on-axis disc. The focal line of the cylindrical lens (b) is the long of horizontal line (Golub, 1986)

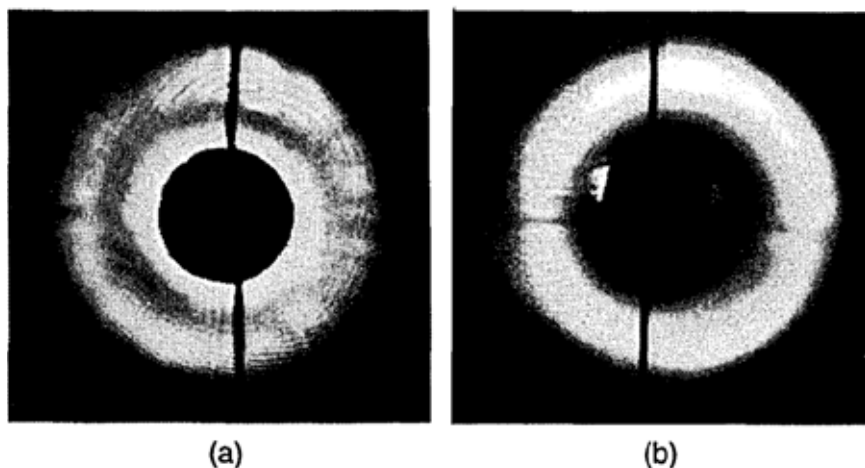


Fig. 2. Supercontinuum generated in D_2O by $0,53\text{-}\mu\text{m}$ laser excitation. The laser is focused into the cell (a) by a spherical lens or (b) by a combination the spherical and cylindrical lenses. The laser beam is blocked with a small of on-axis disc. The focal line of the cylindrical lens (b) is the long of vertical line (Golub, 1990)

axis angle, while for $0,53\text{-}\mu\text{m}$ excitation the pattern is more complicated.

Data of Fig. 2 shown that spatial pattern of the supercontinuum conic radiation is independent of the focusing mode, leading one to conclude that the origin of this emission is at the surface of the filaments.

The possibility of generation the Cherenkov radiation in Kerr media was observed in (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). An influence of velocity the motion of self-focusing focus point and self-modulation on frequency-angle spectra of radiation the parametric anti-Stoke component of Brillouin scattering (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). The possibility of generation Cherenkov radiation in this case was proved.

The white-light continuum spectra for various media are represented in (Trokhimchuck, 2020). Ti:sapphire laser system based on the chirped-pulse amplification technique produced a 1-mJ , 70-fs pulse at 10-Hz repetition rate. The center wavelength was 785 nm , and the bandwidth was 20 nm . This fundamental pulse, which had a diameter of 7 nm , was converted into second- and third-harmonic pulses by doubling and tripling with two $100\text{-}\mu\text{m}$ -thick β -barium borate crystals. The maximum output energies the second- and third-harmonic pulses were 180 and $30\text{ }\mu\text{J}$, respectively.

Conic part of filament radiation has continuum spectrum: from ultraviolet to infrared. At first this

effect was called superbroadening. Therefore it may be interpreted as laser-induced Cherenkov radiation (Golub, 1990; Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). The angle 2θ in the vertex of an angle of Fig. 3 (e) is double Cherenkov angle. In this case we have frozen picture of laser-induced destruction of 4H-SiC (Okada, 2009; Okada, 2012) with help Cherenkov radiation (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022).

Imilar results were received for nanosecond CO_2 -laser irradiation of potassium chloride (Yablonovich, 1971).

The Cherenkov radiation is characterized by two peculiarities (Frank, 1988; Golub, 1990; Jelly, 1958; Trokhimchuck, 2020): 1) creation of heterogeneous shock polarization of matter and, 2) radiation of this polarization. The methods of receiving shock polarization may be various: irradiation by electrons, γ -radiation, ions and excitation with help pulse fields. The stratification of this radiation on other type's radiation (volume, pseudo-Cherenkov a.o.) has relative character and may be represented as laser-induced Cherenkov radiation. Therefore in future we'll be represent conical part of filament radiation as Cherenkov.

This fact may be certified with macroscopic and microscopic ways.

First, macroscopic may be represented according to (Golub, 1990). The similarity between charge particle and light-induced Cherenkov radiation one can invoke the analogy between Snell's law and

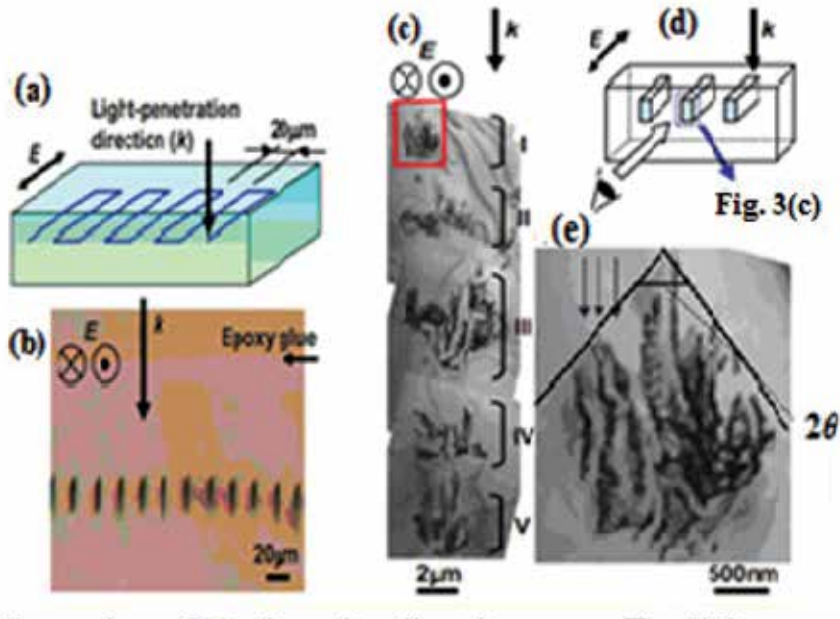


Fig. 3. (a) Schematic illustration of the laser irradiated pattern. The light propagation θ direction (k) and electric field (E) are shown. (b) Optical micrograph of the mechanically thinned sample to show cross sections of laser-irradiated lines (200 nJ/pulse). (c) Bright-field TEM image of the cross section of a line written with pulse energy of 300 nJ/pulse. (d) Schematic illustration of a geometric relationship between the irradiated line and the cross-sectional micrograph. (e) Magnified image of a rectangular area in (c) (Okada, 2009; Okada, 2012)

Cherenkov radiation (Golub, 1990). This natural since both effects can be derived in the same way from the Huygens interference principle. In Fig. 4 (a) the point of intersection of a light pulse impinging at an angle φ on a boundary between two media moves with velocity $V = C/n_1 \cos \varphi$. This relation with Snell's law, gives the Cherenkov relation (Fig. 4(a)) [1].

$$\cos \theta = C/n_2(\omega)V \cdot \quad (1)$$

This formula allows explain the angle differences for various type of Cherenkov radiation. In this case V may be represented as velocity of generation the optical-induced polarization too.

Thus the refraction law a light at the boundary between two media is the same as the condition for Cherenkov emission by a source moving along the boundary. In nonlinear medium the emitted frequencies may differ from the excitation frequency. The Cherenkov relation is still valid since the constructive interference occurs at a given Cherenkov angle for each Fourier frequency component of the light-induced nonlinear

polarization. In a sense, one can speak about a nonlinear Snell-Cherenkov effect (Golub, 1990).

The Cherenkov angle $\cos \theta = C/n_2(\omega)V$ can also be derived from the conservation of the longitudinal component of of the linear momentum at a boundary between two media along which a nonlinear polarization is propagating (Fig. 4 (b)) (Golub, 1990). Using $k = \omega/V$, we obtains

$$\cos \theta = k_{nl_pol}(\omega)/k_{em}(\omega) = V_{em}/V_{nl_pol} = C/n_2(\omega)V_{nl_pol} \cdot \quad (2)$$

The role of the boundary can be played by the surface of self-trapped filament. The nonlinear polarization propagating along this surface will result in a light-induced Cherenkov radiation $\cos \theta = C/n_2(\omega)V$. The nonconservation of the transverse component of the linear momentum can be related to the uncertainty principle, $\Delta x \Delta k > 1$, where Δx is the thickness of the boundary.

The microscopic mechanism of laser-induced Cherenkov radiation is expansion and application of Niels and Aage Bohrs microscopic theory of Cherenkov radiation as part of deceleration radiation on optical case (A. Bohr, 1950; N. Bohr,

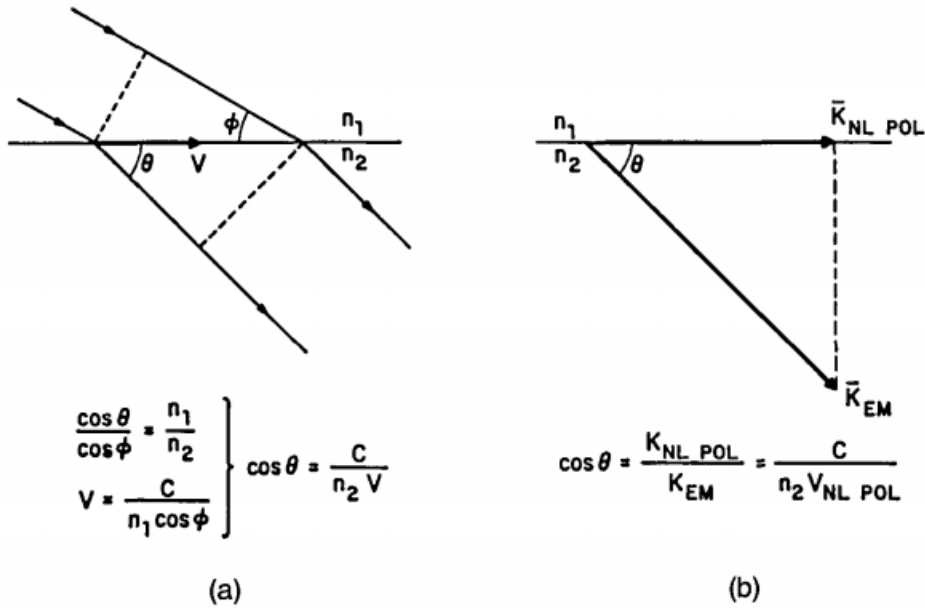


Fig. 4. (a) Analogy between Snell's law and Cherenkov radiation. The point of intersection of a light pulse impinging upon a boundary two media moves with velocity $V = \frac{C}{\cos \phi}$. Combining this relation with Snell's law one obtains the Cherenkov relation, $\cos \theta = \frac{C}{n_2 V}$. (b) The Cherenkov angle relation can be obtained from the conservation of the longitudinal component of a linear momentum at a boundary between two media along which a nonlinear polarization is propagated (Golub, 1990).

1950; Kobzev, 2010). For optical case the Bohrs hyperboloid must be changed on Gaussian distribution of light for mode TEM₀₀ or distribution for focused light of laser beam (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). In this case Cherenkov angle may be determined from next formula

$$\theta_{Ch} + \alpha_{ir} = \pi/2 \text{ or } \theta_{Ch} = \pi/2 - \alpha_{ir}, \quad (3)$$

where α_{ir} – angle between tangent line and direction of laser beam.

Focusing (or self-focusing) angle α_{ir} was determined from next formula

$$\tan \alpha_{ir} = \frac{d_b}{l_{sf}}, \quad (4)$$

where d_b – diameter of laser beam, (7 mm), l_{sf} – length of self-focusing. In our case α_{ir} is angle of focusing or self-focusing (Boyd, 2009; Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022)

This formula is approximate for average angle α_{ir} .

The appearance of the conical part of the radiation can be explained on the basis of the microscopic nature of the Cherenkov radiation (A. Bohr, 1950; Frank, 1988; Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022). The first to draw attention to this were Niels and

Aage Bohr (A. Bohr, 1950; N. Bohr, 1950), and their theory was developed by I. M. Frank and his student A. P. Kobzev (Frank, 1988; Kobzev, 2010). From this point of view, Cherenkov radiation is the inelastic radiation loss of the energy of the incident particle in the medium (A. Bohr, 1950; Frank, 1988; Kobzev, 2010), or in other words, the response of the medium to its polarization by the incident particle.

Fig. 5 shows the scheme that underlies in the N. and A. Bohrs theory (A. Bohr, 1950; N. Bohr, 1950).

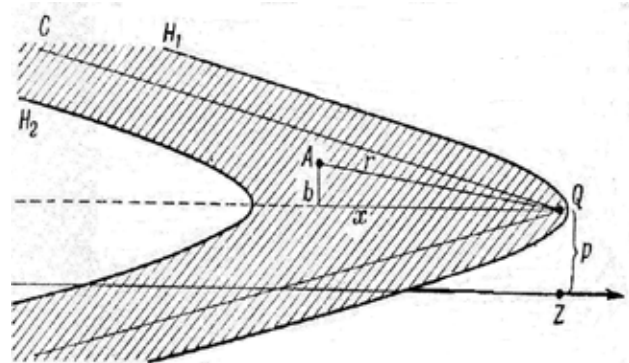


Fig. 5. To the explanation of the deceleration the particle in a medium (A. Bohr, 1950)

We will explain on the basis of Fig. 5. Consider an electron that is at a point Q and collides with a particle Z that flies at a distance p . At the same time, the electron is under the influence of the electrons surrounding it, and those electrons that at the moment of time $t' = t - r/c$ were themselves accelerated give the greatest part of the influence.

The electron at the point A at time t' was in such a phase of collision, which is ahead during time τ the phase of collision of an electron that is at point Q . This lead time is equal to (A. Bohr, 1950)

$$\tau = \frac{r}{c} - \frac{x}{\vartheta}. \quad (5)$$

Introduce $r^2 = x^2 + b^2$ (Fig. 5), we receive from (5) the next correlation

$$\frac{b^2}{\tau^2 c^2 (\gamma^2 - 1)} - \frac{(x + \vartheta \tau \gamma^2)^2}{\vartheta \tau \gamma^2 (\gamma^2 - 1)} = 1, \quad (6)$$

The next conclusion is true: points with a constant τ are placed on a hyperboloid. The electrons that "started" or "ended" collisions are placed approximately on hyperboloids H_1 and H_2 , that corresponds to the times $\tau = -\frac{p}{2\gamma\vartheta}$ and $\tau = +\frac{p}{2\gamma\vartheta}$. Thus the main part of the force with which a matter acts on an electron is between the hyperboloids H_1 and H_2 . For the $\gamma \gg 1$ main part of this region is placed behind the electron at a distance equal or greater than $p\gamma$.

The radiation itself occurs in the angle between the perpendiculars to the surface of the hyperboloid, which corresponds to both the angle of the Cherenkov radiation and its broadband. We present a formal theory of this phenomenon according to (A. Bohr, 1950). In this case, the transverse part of the field (between the perpendiculars to the hyperboloid) is characterized by a vector potential, which expands into a Fourier series

$$\vec{A}_r = \sum_{\lambda} q_{\lambda} \vec{A}_{\lambda} + q_{\lambda}^* \vec{A}_{\lambda}^*, \quad \vec{A}_{\lambda} = \sqrt{4\pi c^2 \Omega}^{-1/2} \vec{e}_{\lambda} e^{i(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{r})}, \quad (7)$$

where values with an asterisk denote complex conjugate values. Here it is assumed that the field is localized in the volume Ω ; and the unit vector \vec{e}_{λ} gives the direction of polarization. Amplitudes q_{λ} in formula (7) are not fully determined; they must satisfy even some of the conditions imposed on their dependence on time.

In the approximation of the constant dielectric constant and neglecting the magnetic properties of the matter, we obtain the following equation

$$\Delta \vec{A} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi \vec{j}}{c}, \quad (8)$$

where \vec{j} is the current density, which corresponds to a moving particle; ε – dielectric constant of the matter. After multiplying equation (8) by \vec{A}_{λ}^* and integrating over the volume Ω , we get

$$(\ddot{q}_{\lambda} + \ddot{q}_{-\lambda}^*) + \omega_{\lambda}^2 (q_{\lambda} + q_{-\lambda}^*) = \frac{z_1 e}{\varepsilon c} (\vec{\vartheta} \cdot \vec{A}_{\lambda}^*(x)), \quad (9)$$

where x characterizes the position of the particle, which is considered to be a point charge. Frequencies are given by the formula

$$\omega_{\lambda} = \frac{k_{\lambda} c}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (10)$$

Next, we assume that the amplitude q_{λ} dependence on time is harmonic $\exp(-i\omega_{\lambda} t)$. As a result of this substitution, equation (9) takes the form

$$\ddot{q}_{\lambda} + \omega_{\lambda}^2 q_{\lambda} = \frac{z_1 e}{2\varepsilon c} \left(1 + \frac{i}{\omega_{\lambda}} \frac{d}{dt}\right) (\vec{\vartheta} \cdot \vec{A}_{\lambda}^*(x)). \quad (11)$$

If the particle moves at a constant speed, then for $x = \vartheta t$ the right side of equation (11) it will harmonically depend on time with frequency $(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})$. Equation (11) is reduced to the following equation

$$\ddot{q}_{\lambda} + \omega_{\lambda}^2 q_{\lambda} = \frac{z_1 e}{2\varepsilon c} \left\{ \frac{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})}{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})} \right\} \left(1 + \frac{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})}{\omega_{\lambda}} \frac{d}{dt}\right) (\vec{\vartheta} \cdot \vec{A}_{\lambda}^*(\vec{\vartheta} t)). \quad (12)$$

Thus, in this particular case, the dispersion of the medium can be taken into account. Only according to equation (12) it is necessary to substitute the value for the dielectric constant, which corresponds to the partial frequency.

As follows from equation (10), in the vacuum the value $\omega_{\lambda} > (\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})$, is as $\vartheta < c$. In this case, the solution of equation (12) will be forced oscillations with constant amplitude. However, in matter with $\vartheta > c$ for some wave numbers, we can get $\omega_{\lambda} = (\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})$, what corresponds to the resonance between the external force and the oscillator. In this case, the oscillator will continuously absorb energy, which corresponds to the actual Cherenkov radiation. The resonance condition, which is described by formula (10), corresponds to the Cherenkov radiation angle $\cos\theta = \frac{c}{\vartheta\sqrt{\varepsilon}}$ (A. Bohr, 1950).

Using the Dirac functions, the general solution of equation (12) can be written as follows

$$q_{\lambda} = \frac{z_1 e}{2c\omega_{\lambda}} \frac{1}{\varepsilon \left\{ \frac{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})}{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})} \right\}} \left(\frac{1}{\omega_{\lambda} - (\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta})} + i\pi\delta(\omega_{\lambda} - \vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{\vartheta}) \right) (\vec{\vartheta} \cdot \vec{A}_{\lambda}^*(\vec{\vartheta} t)). \quad (13)$$

Using equation (13) we determine the force \vec{F}_r that acts on the particle.

$$\vec{F}_r = -\frac{z_1 e}{c} \dot{\vec{A}}_r(\vec{q}t) = -\frac{z_1 e}{c} \sum_{\lambda} \dot{q}_{\lambda} \vec{A}_{\lambda}(\vec{q}t) + \dot{q}_{\lambda}^* \vec{A}_{\lambda}^*(\vec{q}t), \quad (14)$$

That according (13) give

$$\vec{F}_r = -4\pi^2 z_1^2 e^2 \Omega^{-1} \sum_{\lambda} \vec{e}_{\lambda} (\vec{e}_{\lambda} \cdot \vec{q}) \frac{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{q})}{\omega_{\lambda}^2 \{(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{q})\}} \delta(\omega_{\lambda} - (\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{q})). \quad (15)$$

Summing in two directions of polarization, introducing $(\vec{k}_{\lambda} \cdot \vec{q}) = k_{\lambda} \vartheta y$ and moving to an infinitely large volume we get (A. Bohr, 1950; Frank, 1988; Kobzev, 2010)

$$F_r = z_1^2 e^2 \int_0^{\infty} k^2 dk \int_{-1}^{+1} \frac{k \vartheta^2 y}{\omega \varepsilon(k \vartheta y)} (1 - y^2) \delta(\omega - k \vartheta y) dy, \quad (16)$$

where F_r is the force component in the direction of the particle velocity.

In calculating the integral (16), we turn to the new variables, ω and $z = \frac{\vartheta}{c} y \sqrt{\varepsilon(k \vartheta y)}$. Since $\vartheta dx dy = d\omega dz$, we get

$$F_r = \frac{z_1^2 e^2}{c^2} \int_0^{\infty} \omega d\omega \int z \left(1 - \frac{c^2}{\vartheta^2 \varepsilon(\omega z)} \right) \delta(1 - z) dz, \quad (17)$$

where the last integral is extended to the values of z , for which $-1 < \frac{c^2}{\vartheta^2 \varepsilon(\omega z)} < 1$. This integral is nonzero only for $z = 1$, i.e. when the condition is met $\vartheta \sqrt{\varepsilon(\omega)} > c$.

Thus, we finally get the value of the force acting on the particle.

$$F_r = \frac{z_1^2 e^2}{c^2} \int_{\vartheta \sqrt{\varepsilon} > c} \left(1 - \frac{c^2}{\varepsilon \vartheta^2} \right) \omega d\omega, \quad (18)$$

It coincides with the expression obtained by Frank and Tamm for the Cherenkov radiation and its spectral distribution (A. Bohr, 1950; Frank, 1988; Kobzev, 2010).

This model may be used for modeling the optical-induced Cherenkov radiation two. In this case we have more soft regime of excitation this radiation.

Thereby microscopic modified Bohrs theory and macroscopic Golub model are mutually complementary methods.

The decreasing of Cherenkov angle and product $n_2(\omega) V_{nl\ pol}$ for increasing of laser radiation intensity are corresponded to increasing of nonlinear refractive index and decreasing of velocity of polarization (multiphotonic and multiwave processes).

In whole microscopic mechanism of laser-induced Cherenkov radiation may be represented

as nonequilibrium spectrum of all possible Nonlinear Optical phenomena in the local points of propagation the laser beam. It may be Raman and Brillouin scattering, up- and down-conversion, generation of harmonics and various interference of these processes and phenomena, which are generated the continuous spectrum from ultraviolet to infrared regions (Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022).

A significant difference between classical and optically induced Cherenkov radiation in the spectral distribution of radiation. This can be explained on the basis of Fig. 5. The spectrum of classical Cherenkov radiation is determined by a set of hyperboloids that characterize the track of each particle. The unevenness of the spectrum is determined by the density of the stream of incoming particles. In the optical case for the single-mode regime, we have one (or several in the case of diffraction stratification) cone (Fig. 3 (c) and Fig. 3 (e)). Therefore, in this case, the spectral distribution of radiation is more heterogeneous, the short-wavelength part of the spectrum is located closer to the center, and the long-wavelength part is located closer to the edges.

From a microscopic point of view, the Mach cone and its angle are determined by the cascade processes of the formation of the nonlinear polarization front, which is caused by a set of nonlinear optical phenomena: from multiphoton absorption to Brillouin to Raman scattering. According to classic electrodynamics (Landau, 1971) maximal value of this angle determined perpendicular to the surface. which are the generators of the Mach cone. The same radiation spreads in the middle of this cone, if "collectivization" ("plasmization" or thermalization) of this process does not occur during the irradiation. Otherwise, the process will be determined by plasma and temperature gradients, and radiation can be generated in different directions (star effect, etc.) (Trokhimchuck, 2020).

Cherenkov radiation with optical pumping may be represented as Nonlinear Optical process with velocity is less as light phase speed in irradiated matter. In this case phase speed in matter has physical nature: it is the electromagnetic speed of "collective" motion the charge particles or charge in matter. Therefore, in local scale we have Nonlinear Optical processes, which are modulated of the Mach cone the Cherenkov radiation (Fig. 3 (c)).

It allows add the Niels and Aage Bohrs theory about microscopic mechanism of Cherenkov radiation (A. Bohr, 1950; Trokhimchuck, 2020; Trokhimchuck, 2022).

Conclusions

1. Experimental data of continuous conic radiation as optical-induced Cherenkov radiation are analyzed.

2. Comparative analysis of main concepts of Cherenkov radiation are represented.

3. A problem of nature laser-induced Cherenkov radiation is discussed.

4. I. Golub macroscopic model of Cherenkov radiation as analogous of Snell effect is observed.

5. A. Bohr microscopic model was adapted for problem of optical-induced Cherenkov radiation.

6. The synthesis of I. Golub and A. Bohr models was used for the modeling the optical-induced Cherenkov radiation.

7. Some applications of this phenomenon are represented.

BIBLIOGRAPHY:

1. Бор О. Влияние взаимодействия атомов на прохождение зряженных частиц через вещество. В: Н. Бор. Прохождение атомных частиц через вещество. Москва: Иностранная литература, 1950. с. 105–143.
2. Н. Бор. Прохождение атомных частиц через вещество. Москва: Иностранная литература, 1950. 150 с/
3. Boyd R. W., Lukishova S. G., Shen J.-R., editors. Self-Focusing: Past and Present. Springer Series: Topics in Applied Physics. Vol. 114. New York: Springer, 2009. 605 p.
4. Франк И. М. Излучение Вавилова-Черенкова. Теоретические аспекты. Москва: Наука, 1988. 286 с.
5. Golub I. Optical characteristics of supercontinuum generation. Optics Letters. 1990; 15: 305-307.
6. Golub I., Shuker R., Eres G. On the optical characteristics of the conical emission. Optics Communications. Vol. 57, Is. 2, 1986. – P. 143-145
7. Jelley J. V. Čerenkov radiation and its applications. New York: Pergamon, 1958. 304 p.
8. Кобзев А. П. Механизм Черенковского излучения. Элементарные частицы и атомное ядро, том. 41, вып. 3, 2010. – С. 830-867.
9. Landau L. D., Lifshits E. M. The Classical Theory of Fields. Third Revised English Edition. Course of Theoretical Physics, Volume 2. Oxford, etc.: Pergamon Press, 1971. 387 p.
10. Okada T., Tomita T., Matsuo S., Hashimoto S., Ishida Y., Kiyama S., Takahashi T. Formation of periodic strain layers associated with nanovoids inside a silicon carbide single crystal induced by femtosecond laser irradiation. J. Appl. Phys. 2009 v. 106, p.054307, 2009. – 5 p.
11. Okada T., Tomita T., Matsuo S., Hashimoto S., Kashino R., Ito T. Formation of nanovoids in femtosecond laser irradiated single crystal silicon carbide. Material Science Forum. 2012; 725: 19 – 22.
12. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions. Saarbrücken: Lambert Academic Press, 2020. 249 p.
13. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Modelling and Discussions 2. Saarbrücken, Cisiau: Lambert Academic Press, 2022. 210 p.
14. Yablonovich E. Optical Dielectric Srength of AlkaliHalide Crystals Obtained by Laserinduced Breakdown. Appl. Phys. Lett. 1971; 19: 495-497.

REFERENCES:

1. Bohr, A. (1950) The influence of atoms interactions on the penetration of particles through matter. In: N. Bohr. The penetration of atomic particles through matter. Moscow: Inostrannaya literatura, pp. 105–143. (In Russian)
2. Bohr, N. (1950) The penetration of atomic particles through matter. Moscow: Inostrannaya literatura, 144 p. (In Russian)
3. Boyd R. W., Lukishova S. G., Shen J.-R., (2009) editors. Self-Focusing: Past and Present. Springer Series: Topics in Applied Physics. Vol. 114. New York: Springer, 605 p.
4. Frank, I. M. (1988) Vavilov-Cherenkov radiation. Theoretical aspects. Moscow: Nauka, 286 p. (In Russian)
5. Golub, I. (1990) Optical characteristics of supercontinuum generation. Optics Letters, vol. 15, pp. 305-307.
6. Golub I., Shuker R., Eres G. (1986) *On the optical characteristics of the conical emission*. Optics Communications, vol. 57, is. 2, pp. 143-145.
7. Jelley, J. V. (1958) Čerenkov radiation and its applications. New York: Pergamon, 304 p.
8. Kobzev, A. P. (2010) Cherenkov radiation mechanism. EPAN, vol.41, is.3, pp. 830-867. (In Russian)
9. Landau L. D., Lifshits E. M. (1971) The Classical Theory of Fields. Third Revised English Edition. Course of Theoretical Physics, Volume 2. Oxford, etc.: Pergamon Press, 387 p.
10. Okada T., Tomita T., Matsuo S., Hashimoto S., Ishida Y., Kiyama S., Takahashi T. (2009) Formation of periodic strain layers associated with nanovoids inside a silicon carbide single crystal induced by femtosecond laser irradiation. J. Appl. Phys., vol. 106, p.054307, 5 p.

11. Okada T., Tomita T., Matsuo S., Hashimoto S., Kashino R., Ito T. (2012) Formation of nanovoids in femtosecond laser irradiated single crystal silicon carbide. *Material Science Forum*, vol. 725, pp. 19 – 22.
12. Trokhimchuck, (2020) P. P. *Relaxed Optics: Modelling and Discussions*. Saarbrücken: Lambert Academic Press, 249 p.
13. Trokhimchuck, P. P. (2022) *Relaxed Optics: Modelling and Discussions 2*. Saarbrücken, Cisinan: Lambert Academic Press, 210 p.
14. Yablonovich E. (1971) Optical Dielectric Strength of AlkaliHalide Crystals Obtained by Laserinduced Breakdown. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 19, is. 11, P. 495-497.

УДК 621.315.592

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-8>

Тетяна ЯЦИНЮК

аспірант навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0001-7288-3189

SCOPUS-AUTHOR ID: 57658704300

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, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0002-3581-8852

SCOPUS-AUTHOR ID: 35422272900

Володимир ГАЛЯН

доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0003-0066-7174

SCOPUS-AUTHOR ID: 35422525700

Інна ІВАЩЕНКО

кандидат хімічних наук, професор кафедри хімії та технологій факультету хімії, екології та фармації, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0001-9724-0737

SCOPUS-AUTHOR ID: 7003831212

Віталій АРТЮХ

аспірант навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0002-7785-6072

Костянтин МЕЛЬНИЧУК

студент навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0001-5666-0698

Дмитро ІВАНЮК

студент навчально-наукового фізико-технологічного інституту, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Воли 13, м. Луцьк, Україна, 43025

ORCID ID: 0000-0003-0807-2140

Бібліографічний опис статті: Яцинюк, Т., Кевшин, А., Галян, В., Іващенко, І., Артюх В., Мельничук, К., Іванюк, Д. (2022). Вплив дефектів і домішок на структуру та властивості халькогенідних напівпровідників. *Фізика та освітні технології*, 2, 54–60, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-8>

ВПЛИВ ДЕФЕКТІВ І ДОМІШОК НА СТРУКТУРУ ТА ВЛАСТИВОСТІ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ

Багатокомпонентні халькогенідні напівпровідники характеризуються високою концентрацією різних типів дефектів. Ефекти, що індуковані світлом (фотокристалізація, фотоіндукована анізотропія, фотоаморфізація,

збільшення щільності речовини при освітленні, фото- потемніння та просвітління) є найбільше поширеними, в халькогенідних стеклах і обумовлюють трансформації структури та виникнення дефектних станів.

Фотоіндуковані явища та відповідні структурні зміни в халькогенідних стеклах теоретично обґрунтовані на основі існування заряджених дефектів зв'язку, які бувають трьох типів: D^+ , D^- і D^0 . Точковий дефект у вигляді атома з обірваним зв'язком може не містити у точці розриву електрони (D^+), мати один електрон (D^0) або два електрони (D^-). Точкові дефекти з обірваним зв'язком є причиною великої кількості електронних переходів, що зумовлюють люмінесценцію, оптичне поглинання, термічне збудження та рекомбінацію.

Структурна впорядкованість та властивості кристалічних матеріалів визначаються наявністю в них рівноважних і нерівноважних дефектів решітки. Зокрема, пластична деформація кристалів зводиться до руху різних дефектів решітки, теплове розширення кристалів обумовлено не тільки ангармонізмом коливань атомів, а й зростанням концентрації дефектів кристалічної решітки.

Проаналізовано роботи, які присвячені дослідженню впливу γ -опромінення на оптичні та електричні властивості напівпровідників. Встановлено, що збільшення дози опромінення приводить до зменшення інтенсивності фотолюмінесценції як у кристалічних, так і в склоподібних зразках. Особливо чутливі до впливу радіації виявились селенідні стекла та кристали. Дослідження процесів дефектоутворення в халькогенідних напівпровідниках створює нові можливості для синтезу матеріалів перспективних в оптоелектронній техніці.

Ключові слова: Халькогенідний напівпровідник, точковий дефект, модель структури, обірваний зв'язок.

Tetiana YATSYNIUK

graduate student of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0001-7288-3189

SCOPUS-AUTHOR ID: 57658704300

Andriy KEVSHYN

candidate of Physical and Mathematical Sciences, associate professor of the department of experimental physics, information and educational technologies of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0002-3581-8852

SCOPUS-AUTHOR ID: 35422272900

Volodymyr HALYAN

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the department of experimental physics, information and educational technologies of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0003-0066-7174

SCOPUS-AUTHOR ID: 35422525700

Inna IVASHCHENKO

candidate of chemical sciences, professor of the Department of Chemistry and Technologies, Faculty of Chemistry, Ecology and Pharmacy, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0001-9724-0737

SCOPUS-AUTHOR ID: 7003831212

Vitalii ARTIUKH

graduate student of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0002-7785-6072

Kostiantyn MELNYCHUK

student of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0001-5666-0698

Dmytro IVANIUK

student of the Educational and Scientific Institute of Physics and Technology, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025

ORCID ID: 0000-0003-0807-2140

To cite this article: Yatsyniuk, T., Kevshyn, A., Halyan, V., Artiukh, V., Melnychuk, K., Ivanyuk, D. (2022). Vplyv defektiv i domishok na strukturu ta vlastyvoli khalkohenidnykh napivprovodnykiv [Influence of defects and impurities on the structure and properties of chalcogenated semiconductors]. *Physics and Educational Technology*, 2, 54–60, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-8>

INFLUENCE OF DEFECTS AND IMPURITIES ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF CHALCOGENATED SEMICONDUCTORS

Multicomponent chalcogenide semiconductors are characterized by a high concentration of various types of defects. Effects induced by light (photocrystallization, photoinduced anisotropy, photoamorphization, increase in density of matter under illumination, photodarkening, and brightening) are the most common in chalcogenide glasses and cause structural transformations and the emergence of defect states.

Photoinduced phenomena and corresponding structural changes in chalcogenide glasses are theoretically grounded on the basis of charged bond defects, which are of three types: D^+ , D^- , and D^0 . A point defect in the form of an atom with a broken bond may contain no electrons at the breaking point (D^+), have one electron (D^0) or two electrons (D^-). Point defects with a broken bond are responsible for a large number of electronic transitions that cause luminescence, optical absorption, thermal excitation, and recombination.

The structural ordering and properties of crystalline materials are determined by the presence of equilibrium and non-equilibrium lattice defects in them. In particular, the plastic deformation of crystals is reduced to the movement of various lattice defects, the thermal expansion of crystals is caused not only by the anharmonicity of atomic vibrations, but also by the increase in the concentration of crystal lattice defects.

The works devoted to the study of the effect of γ -irradiation on the optical and electrical properties of semiconductors were analyzed. It was established that an increase in the irradiation dose leads to a decrease in the intensity of photoluminescence in both crystalline and vitreous samples. Selenide glasses and crystals turned out to be particularly sensitive to the influence of radiation. The study of defect formation processes in chalcogenide semiconductors creates new opportunities for the synthesis of promising materials in optoelectronic technology.

Key words: chalcogenide semiconductor, point defect, structure model, broken bond.

Вступ

Багатокомпонентні халькогенідні напівпровідники – це винятковий клас матеріалів, що містять один або декількох халькогенних елементів (сірки, селену, телуру) і характеризуються високою концентрацією дефектів. У більшості, вони мають технологічне походження: у стеклах виникають завдяки швидкому охолодженню з розплаву, в кристалах – під час синтезу, в результаті теплових флуктуацій атомів речовини. Крім того, дефекти можуть бути індуковані світлом або внаслідок радіаційного опромінення.

Найбільше поширеними ефектами, що індукуються світлом, в халькогенідних стеклах є: фотокристалізація, фотоіндукована анізотропія, фотоаморфізація, збільшення щільності речовини при освітленні, фото-потемніння та просвітління. Ці ефекти пов'язані зі змінами показника заломлення, коефіцієнта оптичного поглинання, енергії забороненої зони, об'єму та основних оптичних констант. Халькогенідні склоподібні напівпровідники є метастабільними внаслідок відсутності далекого порядку в цих матеріалах. Їх структура може трансформуватися з одного метастабільного стану в інший, завдяки, так званій, «структурній гнучкості».

Результати досліджень

Матеріали, в яких введено халькоген (S, Se і Te) проявляють ковалентні зв'язки із сусідніми хімічними елементами в стабільних конденсованих фазах згідно з правилом Н. Мотта (8-N) (Мотт, 1982). У цьому механізмі серед шести зовнішніх електронів із конфігурацією s^2p^4 чотири електрони р стану беруть участь у ковалентному зв'язку, а решта два електрони, які не зв'язані називають «одинокую парою».

Протягом багатьох років науковці працювали над відповідними методиками щодо визначення щільності дефектних станів. Наприклад, М. Брінза (Brinza, 2005) досліджував швидкість спаду фотоструму в халькогенідних стеклах і дійшов висновку, що щільність станів у «хвостах» енергетичних зон зменшується хаотично та не містить чітко визначеної закономірності. А. Закері, С. Елліот (Zakery, 2005) припустили, що у «хвостах» енергетичних зон існують особливі густини станів, які обумовлені модифікованими валентними парами електронів (Такака, 1984). За допомогою цієї моделі було пояснено відсутність фотозатемнення у тонких плівках As_2S_3 , товщина яких становить менше 50 нм. Це явище не зустрічається в інших аморфних напівпровідниках та в кристалічних халькогенідах.

Серед фотоіндукованих процесів відзначимо цікаве явище, яке спостерігали автори роботи (Kuzukawa, 1998) в аморфних плівках. Під дією світла деякі з них розширюються (плівки $a\text{-As}_2\text{S}_3$, $a\text{-As}_2\text{Se}_3$), а інші, такі як $a\text{-GeS}_2$, $a\text{-GeSe}_2$, стискаються.

Отже, спостережувані фотоіндуковані зміни в халькогенідах можуть бути двох типів – незворотні та оборотні фотоіндуковані модифікації. В обох випадках відбуваються деякі фотохімічні реакції або фотоструктурні зміни аморфних халькогенідних систем. Для пояснення цих явищ Р. Стріт (Street, 1977) запропонував модель впливу світла на властивості аморфних халькогенідних систем, засновану на створенні в процесі його дії електрично заряджених дефектів внаслідок розриву ковалентних зв'язків. Згідно з цією моделлю, генерація електронно-діркових пар відбувається після поглинання фотонів, внаслідок чого виникає квазічастинка – екситон. Збудження екситонів збільшує коефіцієнт поглинання, що приводить до зсуву краю оптичного поглинання. Ця модель передбачає зміну валентних пар, коли розриваються катіон-аніонні зв'язки і утворюються гомополярні зв'язані пари.

Н. Тойозава та К. Танака (Toyosava, 1996) для пояснення явищ фотозатемнення та відповідних структурних змін теоретично обґрунтували існування заряджених дефектів зв'язку, які бувають трьох типів: D^+ , D^- і D^0 . Точковий дефект у вигляді атома з обірваним зв'язком може не містити у точці розриву електрони (D^+), мати один електрон (D^0) або два електрони (D^-). Індекс позначає заряд дефектного центру. Автори робіт (Мотт, 1982; Anderson, 1975) вказують, що внаслідок сильного викривлення решітки навколо дефекту, реакція $2D^0 \rightarrow D^+ + D^-$ є екзотермічною, тому при нормальних умовах умовах дефекти повинні бути позитивно або негативно заряджені. Нейтральний дефект D^0 виникає тільки в результаті збудження, внаслідок дії зовнішніх чинників. На рис. 1 показана енергетична діаграма з системою енергетичних рівнів, які відповідають дефектним центрам D^+ , D^- , D^0 . Рівні А, В, С розташовані вище стелі валентної зони, для яких енергії E_A , E_B , E_C відповідають переходам між D^+ , D^- -центрами, W – енергія полярона. Рівні А', В', С' відповідають переходам між D^- , D^0 -центрами. E_1 , E_2 позначають енергії термічного збудження D^- , D^0 -цен-

трів у відповідності з реакціями: $D^- \rightarrow D^0 + e$, $D^0 \rightarrow D^+ + e$.

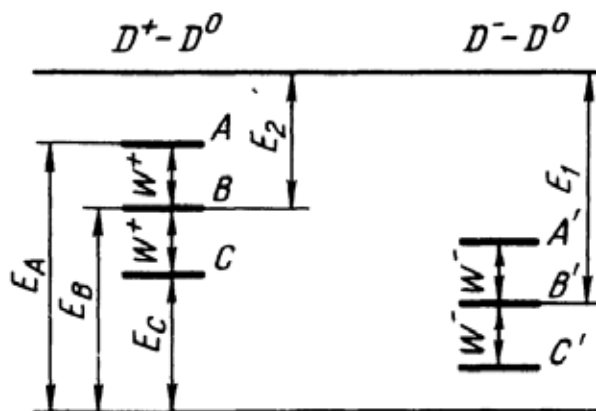


Рис. 1. Енергетична діаграма D^+ , D^- , D^0 -станів в халькогенідних матеріалах (Street, 1975)

Точкові дефекти з обірваним зв'язком (рис. 2) є причиною великої кількості електронних переходів, що зумовлюють люмінесценцію, оптичне поглинання, термічне збудження та рекомбінацію. Така модель дефектів добре пояснює ряд експериментальних явищ в халькогенідних напівпровідниках. Відсутність ЕПР-сигналу пов'язують з відсутністю неспарених електронів, тобто при нормальних умовах відсутні D^0 -центри. При освітленні матеріалу відбуваються наступні реакції: D^+ (рівень А) $\rightarrow D^0 + p$, D^- (рівень С') $\rightarrow D^0 + e$, внаслідок чого утворюються неспарені електрони на D^0 -центрах і виникає сигнал ЕПР. Модель з обірваними зв'язками (іноді називають моделлю квазіатомних дефектів) добре пояснює закріплення посередині забороненої зони рівня Фермі в широкому температурному інтервалі, провідність на постійному струмі, оптичне поглинання та фотолюмінесценцію (Street, 1975; Mott, 1975).

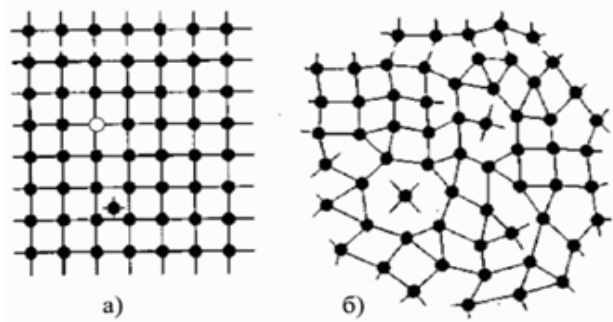


Рис. 2 Найпростіші дефекти, пов'язані з порушенням правильної координації в кристалічному (а) та аморфному (б) середовищах

Крім точкових дефектів в стеклах можуть виникати кластери, які містять декілька атомів основної речовини або домішок. Автори роботи (Shpotyuk, 2016) встановили, що введення домішок Cu, Ag, Au до склоутворюючої матриці на основі As(Ge)–S(Se) приводить до неомогенності структури та виникнення кластерів, розміри яких становлять близько 3-10 нм. Крім того, було досліджено утворення кластерів в халькогенідах (Gushchin, 2019) з участю перехідних металів п'ятої групи – V, Nb, Ta (рис. 3). Основною характерною рисою в структурі таких кластерів є утворення прямих зв'язків метал-метал, які можуть проявляти властивості фотокаталізу.

Для халькогенідних кристалів (на відміну від склоподібних) характерний далекий порядок, проте відсутня ідеальна структурна впорядкованість. Навіть при термодинамічній рівновазі існують дефекти кристалічної решітки (рис. 3 а), що є невід'ємними компонентами кристалу. Крім рівноважних дефектів решітки, існують нерівноважні, обумовлені недосконалими технологічними умовами росту кристалу. Завдяки тепловому руху ці дефекти не можуть повністю зникнути навіть за досить тривалий час. Найчастіше нерівноважні дефекти решітки стабілізуються електромагнітними полями, що виникають при рості кристалу, фазових перетвореннях або зовнішніх впливах. Концентрацію нерівноважних дефектів решітки вдається істотно знизити вдосконаленням методів отримання та обробки кристалів.

Структурна впорядкованість та властивості кристалічних матеріалів визначаються наявністю в них рівноважних і нерівноважних дефектів решітки. Зовнішні чинники (електро-

магнітне поле, температура, механічна напруга, радіація і т.п.) впливають на утворення, трансформацію, рух і анігіляцію дефектів решітки. Зокрема, пластична деформація кристалів зводиться до руху різних дефектів решітки, теплове розширення кристалів обумовлено не тільки ангармонізмом коливань атомів, а й зростанням концентрації дефектів кристалічної решітки.

Особливу увагу науковці приділяють виникненню радіаційно індукованих дефектів в напівпровідниках. Виявлено, що у склоподібних сплавах As_2S_3 , $AsGeSe$ внаслідок гамма- та нейтронного опромінення відбуваються зміни в області фундаментального поглинання (Конорова, 1985; Конорова, 1989; Конорова, 1993). Зауважимо, що в інфрачервоному спектральному діапазоні (2,5 – 25 мкм) при дії γ -опромінення на ці зразки, їх прозорість не змінилась, але виявлено значну чутливість домішкового поглинання до нейтронного опромінення (Конорова, 1989; Конорова, 1987). Роботи М. Шпотюка (Shpotyuk, 2017; Shpotyuk, 2018) присвячена дослідженню структурної модифікації халькогенідних стекел під впливом γ -опромінення та виникненню радіаційно-індукованих оптичних ефектів. Незважаючи на значну кількість робіт, присвячених дослідженню впливу γ -опромінення на оптичні та електричні властивості напівпровідників, надзвичайно мало робіт присвячено вивченню впливу радіації на ФЛ властивості халькогенідів. Зокрема, Б.Т. Коломієць і інші (Kolomiets, 1971) дослідили вплив γ -опромінення (джерело ^{60}Co) на рекомбінаційну ФЛ в кристалічному та склоподібному As_2S_3 , і As_2Se_3 . Встановлено, що збільшення дози опромінення приводить до зменшення інтенсивності ФЛ (за температури рідкого азоту) як у кристалічних, так і в склопо-

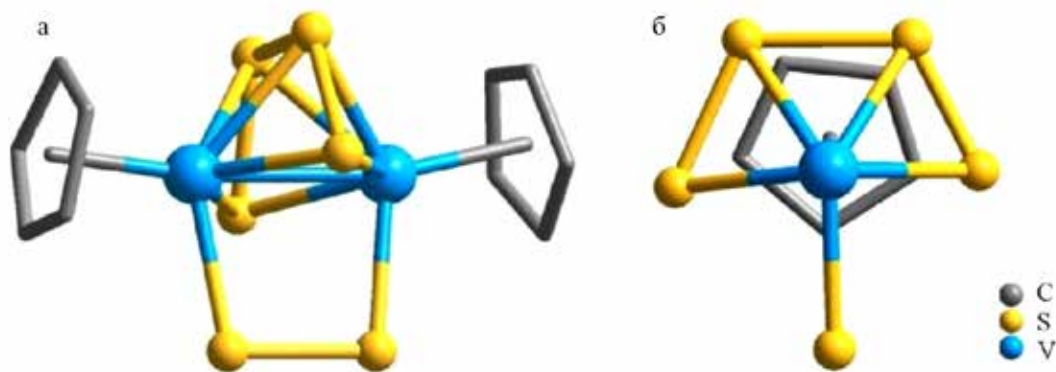


Рис. 3. Модель структури комплексу $[Cr_2V_2S_6]$ (Gushchin, 2019)

дібних зразках. Чутливішим до впливу радіації виявились селенідні стекла та кристали. Автори роботи вважають, що причиною таких змін є виникнення радіаційно індукованих дефектів, природа яких наразі не встановлена.

Індуковані γ -променями дефекти досліджують методом ЕПР-спектроскопії. Концентрація радіаційно індукованих парамагнітних дефектів може становити $10^{16} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$, залежно від складу халькогенідної матриці та дози опромінення. Вони виникають при γ -опроміненні внаслідок обриву хімічних зв'язків халькогену.

Висновки

Отже, найважливіші властивості халькогенідних напівпровідників визначаються структурою, вмістом оптично й електрично активних

дефектів кристалічної решітки та склоутворюючої матриці. Зокрема, точкові дефекти є причиною великої кількості електронних переходів, що зумовлюють люмінесценцію, оптичне поглинання, термічне збудження та рекомбінацію. Зовнішні чинники (електромагнітне поле, температура, механічна напруга, радіація і т.п.) впливають на утворення, трансформацію, рух і анігіляцію дефектів кристалічної решітки та скляної матриці халькогенідних напівпровідників. Дослідження кількісного та якісного складу дефектів в халькогенідах і процесів поглинання/випромінювання, що зумовлено зовнішніми чинниками, створює нові можливості для конструювання матеріалів перспективних в оптоелектронній техніці.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Мотт Я., Девис Э. Электронные явления в некристаллических веществах. М.: Мир, 1982. 664 с.
2. Brinza M., Benkhedir M. L., Willekens J. [and others] Photoconductivity methods in materials research. *J. Mater. Sci. Mater. Elect.* 2005. Vol. 16. P. 703–713.
3. Zakery A., Elliott S. R. *Optical Nonlinearities in Chalcogenide Glasses and their Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010. 202 p.
4. Tanaka K., Kyohya S., Odajima A. Anomaly of the thickness dependence of photodarkening in amorphous chalcogenide films. *Thin Solid Films*. 1984. V. 111. P. 195–200.
5. Kuzukawa Y., Ganjoo A., Shimakawa K. Photoinduced structural changes in obliquely deposited As- and Ge-based amorphous chalcogenides: correlation between changes in thickness and band gap. *J. Non Cryst. Solids*. 1998. V. 227–230. P. 715–718.
6. Street R. A. Non-radiative recombination in chalcogenide glasses / *Sol. Stat. Comm.* 1977. Vol. 24. P. 363–365.
7. Toyosava N., Tanaka K. Photocurrent enhancement in light-soaked As_2S_3 glass *Sol. Stat. Comm.* 1996. Vol. 97. P. 623–626.
8. Anderson P. W. Model for the Electronic Structure of Amorphous Semiconductors / *Phys. Rev. Lett.* 1975. Vol. 34, №15. P. 953–955.
9. Street R. A., Mott N. F. States in the Gap in Glassy Semiconductors / *Phys. Rev. Lett.* 1975. Vol. 35, № 19. P. 1293–1296.
10. Mott N. F., Davis E., Street R. States in the gap and recombination in amorphous semiconductors / *Phil. Mag.* 1975. Vol. 32, №5. P. 961–996.
11. Shpotyuk M. V., Shpotyuk O. I., Cebulski J., Kozyukhin S. Destructive clustering of metal nanoparticles in chalcogenide and oxide glassy matrices / *Nanoscale Res. Lett.* 2016. Vol. 11. P. 34-1–34-6.
12. Gushchin A. L., Rogachev A. V., Fomenko Y. S., Sokolov M. N. Chalcogenide Cluster Complexes of Group Five Transition Metals: Synthetic and Structural Aspects / *J. Struct. Chem.* 2019. Vol. 60 (10). P. 1531–1577.
13. Конорова Л. Ф., Ким Т. И., Жданович Н. С., Литовский М. А. Влияние γ -квантов на ИК поглощение в халькогенидных стеклообразных сплавах. *Ж. техн. физ.* 1985. Vol. 55(4). P. 788–791.
14. Конорова Л. Ф., Жданович Н. С., Дидик В. А., Прудников И. М. О структурных изменениях в стеклообразном AsGeSe , облученном большими дозами нейтронов / *ФТП*. 1989. Vol. 23(4). P. 706–709.
15. Конорова Л. Ф., Жданович Н. С. Влияние нейтронного облучения на инфракрасное поглощение в стеклообразном трисульфиде мышьяка. *ФТП*. 1993. Vol. 27(3). P. 470–473.
16. Конорова Л. Ф., Ким Т. И., Жданович Н. С., Литовский М. А. Влияние γ -квантов на ИК поглощение в стеклообразном AsGeSe , содержащим металлы / *ФТП*. 1987. Vol. 21(7), P. 1300–1302.
17. Shpotyuk M., Shpotyuk O., Golovchak R., McCloy J., Riley B. Compositional trends of γ -induced optical changes observed in chalcogenide glasses of binary As-S system / *J. Non Cryst. Solids*. 2014. Vol. 386. P. 95–99.
18. Shpotyuk M., Kovalskiy A., Golovchak R., Shpotyuk O. Phenomenology of γ -irradiation-induced changes in optical properties of chalcogenide semiconductor glasses: A case study of binary arsenic sulfides. *J Non Cryst Solids*. 2018. Vol. 498. P. 315–322.

19. Kolomiets B. T., Mamontova T. N., Domoryad I. A., Babaev A. A. Photoluminescence in γ -irradiated vitreous and monocrystalline As_2S_3 and As_2Se_3 / Phys. Stat. Sol. (a). 1971. Vol. 7. P. K29–K32.

REFERENCES:

1. Mott Ya., Devis E. Elektronnie yavleniya v nekristallicheskih veshchestvakh. M.: Mir, 1982. 664 s.
2. Brinza M., Benkhedir M. L., Willekens J. [and others] Photoconductivity methods in materials research . J. Mater. Sci. Mater. Elect. 2005. Vol. 16. P. 703–713.
3. Zakery A., Elliott S. R. Optical Nonlinearities in Chalcogenide Glasses and their Applications. Berlin, Heidelberg : Springer, 2010. 202 p.
4. Tanaka K., Kyohya S., Odajima A. Anomaly of the thickness dependence of photodarkening in amorphous chalcogenide films. Thin Solid Films. 1984. V. 111. P. 195–200.
5. Kuzukawa Y., Ganjoo A., Shimakawa K. Photoinduced structural changes in obliquely deposited As- and Ge-based amorphous chalcogenides: correlation between changes in thickness and band gap. J. Non Cryst. Solids. 1998. V. 227–230. P. 715–718.
6. Street R. A. Non-radiative recombination in chalcogenide glasses / Sol. Stat. Comm. 1977. Vol. 24. P. 363–365.
7. Toyosava N., Tanaka K. Photocurrent enhancement in light-soaked As_2S_3 glass Sol. Stat. Comm. 1996. Vol. 97. P. 623–626.
8. Anderson P. W. Model for the Electronic Structure of Amorphous Semiconductors / Phys. Rev. Lett. 1975. Vol. 34, №15. P. 953–955.
9. Street R. A., Mott N. F. . States in the Gap in Glassy Semiconductors / Phys. Rev. Lett. 1975. Vol. 35, №19. P. 1293–1296.
10. Mott N. F., Davis E., Street R.. States in the gap and recombination in amorphous semiconductors /. Phil. Mag. 1975. Vol. 32, №5. P. 961–996.
11. Shpotyuk M. V., Shpotyuk O. I., Cebulski J., Kozyukhin S. Destructive clustering of metal nanoparticles in chalcogenide and oxide glassy matrices / Nanoscale Res. Lett. 2016. Vol. 11. P. 34-1–34-6.
12. Gushchin A. L., Rogachev A. V., Fomenko Y. S., Sokolov M. N. Chalcogenide Cluster Complexes of Group Five Transition Metals: Synthetic and Structural Aspects / J. Struct. Chem. 2019. Vol. 60 (10). P. 1531–1577.
13. Konorova L. F., Kym T. Y., Zhdanovych N. S., Lytovskiy M. A. Vlyianyie γ -kvantov na YK pohloshchenye v khalkohenydnykh stekloobraznykh splavakh. Zh. tekhn. fiz. 1985. Vol. 55(4). P. 788–791.
14. Konorova L. F., Zhdanovych N. S., Dydyk V. A., Prudnykov Y. M.. O strukturnykh yzmenenyakh v stekloobraznom $AsGeSe$, obluchennom bolshymy dozamy neutronov / FTP. 1989. Vol. 23(4). P. 706–709.
15. Konorova L. F., Zhdanovych N. S.,. Vlyianyie neutronnogo obluchenyia na infrakrasnoe pohloshchenye v stekloobraznom trysulfyde myshiaka. FTP. 1993. Vol. 27(3). P. 470–473.
16. Konorova L. F., Kym T. Y., Zhdanovych N. S., Lytovskiy M. A.. Vlyianyie γ -kvantov na YK pohloshchenye v stekloobraznom $AsGeSe$, sodержashchym metally / FTP. 1987. Vol. 21(7), P. 1300–1302.
17. Shpotyuk M., Shpotyuk O., Golovchak R., McCloy J., Riley B. Compositional trends of γ -induced optical changes observed in chalcogenide glasses of binary As-S system / J. Non Cryst. Solids. 2014. Vol. 386. P. 95–99.
18. Shpotyuk M., Kovalskiy A., Golovchak R., Shpotyuk O. Phenomenology of γ -irradiation-induced changes in optical properties of chalcogenide semiconductor glasses: A case study of binary arsenic sulfides . J Non Cryst Solids. 2018. Vol. 498. P. 315–322.
19. Kolomiets B. T., Mamontova T. N., Domoryad I. A., Babaev A. A. Photoluminescence in γ -irradiated vitreous and monocrystalline As_2S_3 and As_2Se_3 / Phys. Stat. Sol. (a). 1971. Vol. 7. P. K29–K32.

УДК 53(07):004

DOI <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-9>

Вадим МУЛЯР

кандидат педагогічних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-4774-3947>

Світлана ЯЦЮК

кандидат педагогічних наук, доцент кафедри загальної математики та методики навчання інформатики, декан факультету інформаційних технологій і математики, Волинський національний університет імені Лесі, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8369-6060>
SCOPUS-AUTHOR ID: 57221874892

Валентина ЮНЧИК

старший викладач кафедри загальної математики та методики навчання інформатики, заступник декана з навчально-методичної роботи факультету інформаційних технологій і математики, Волинський національний університет імені Лесі, пр. Волі 13, м. Луцьк, Україна, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3500-1508>
SCOPUS-AUTHOR ID: 57218347265

Бібліографічний опис статті: Муляр, В., Яцюк, С., Юнчик, В. (2022). Комп'ютерне моделювання у підготовці майбутніх вчителів фізики, математики та інформатики. *Фізика та освітні технології*, 2, 61–69, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-9>

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ПІДГОТОВЦІ МАЙБУТНІХ ВЧИТЕЛІВ ФІЗИКИ, МАТЕМАТИКИ ТА ІНФОРМАТИКИ

У статті розкрито дидактичні можливості комп'ютерного моделювання у процесі професійної підготовки майбутніх вчителів фізики, математики та інформатики. Встановлено, що на сучасному етапі інформатизації освіти важливе місце посідають міждисциплінарні знання, нові інформаційні технології та вміння їх застосування в освітньому процесі. З огляду на це, підготовка сучасного, здатного до навчання протягом всього життя фахівця неможлива без уміння застосовувати наукові методи пізнання в освітньому процесі, здійснювати інтегроване навчання учнів. Встановлено, що розвиток фізики та інших наук відбувається в тісній єдності з розвитком методу моделювання. Моделювання в освітньому процесі одночасно виступає методом наукового пізнання, є частиною змісту навчального матеріалу різних дисциплін (предметів) та ефективним засобом їх вивчення. Особливо зросла роль в науці й освітньому процесі методу моделювання із появою комп'ютерних моделей. Використовуючи моделі, які реалізовані за допомогою програмних засобів, дослідник може змінювати відповідні параметри досліджуваного об'єкта, встановлювати функціональні залежності між відповідними величинами тощо. Поряд з тим, для оволодіння моделюванням як методом наукового пізнання студенту (учневі) недостатньо ознайомитись із поняттями моделі та моделюванням, проводити дослідження із використанням комп'ютерних моделей. Потрібно, щоб студенти (учні) були залучені до процесу створення комп'ютерних моделей. Це дозволить студентам (учням) ознайомитись з етапами побудови комп'ютерних моделей, глибше зрозуміти суть логічних відношень між оригіналом і комп'ютерною моделлю. Встановлено, що одним із інструментів створення комп'ютерних моделей на мові програмування Java є технологія JavaFX. Вона дозволяє створювати додатки з використанням візуальних ефектів, трансформації та анімації зображень, декларативного способу опису інтерфейсу за допомогою мови розмітки FXML, стилізації інтерфейсу за допомогою CSS та ін. Проілюстровано процес створення комп'ютерної моделі на основі JavaFX у лабораторній роботі «Рух молекул газу під дією сили тяжіння», яку студенти виконують при вивченні курсу «Моделювання фізичних явищ і процесів».

Ключові слова: JavaFX, інформаційна компетентність, моделювання, комп'ютерне моделювання, комп'ютерна модель.

Vadym MULIAR

Candidate of Pedagogical Sciences, Associate Professor at the Department of Experimental Physics, Information and Educational Technologies, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Voli Ave., Lutsk, Ukraine, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-4774-3947>

Svitlana YATSIUK

Candidate of Pedagogical Sciences, Associate Professor at the Department of General Mathematics and Teaching Methods of Informatics, Dean of the Faculty of Information Technologies and Mathematics, Lesya Volyn National University, 13 Voli Ave., Lutsk, Ukraine, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8369-6060>
SCOPUS-AUTHOR ID: 57221874892

Valentina YUNCHYK

Senior Lecturer at the Department of General Mathematics and Computer Science Teaching Methods, Deputy Dean for Educational and Methodological Work of the Faculty of Information Technologies and Mathematics, Lesya Volyn National University, 13 Voli Ave., Lutsk, Ukraine, 43025
ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-3500-1508>
SCOPUS-AUTHOR ID: 57218347265

To cite this article: Muliar, V., Yatsiuk, S., Yunchyk, V. (2022). Komp'юттерне modeliuвання u pidhotovtsi maibutnikh vchyteliv fizyky, matematyky ta informatyky [Computer simulation in the training of future teachers of physics, mathematics and informatics]. *Physics and Educational Technology*, 2, 61–69, doi: <https://doi.org/10.32782/pet-2022-2-9>

COMPUTER SIMULATION IN THE TRAINING OF FUTURE TEACHERS OF PHYSICS, MATHEMATICS AND INFORMATICS

The article reveals the didactic possibilities of computer modeling in the process of professional training of future teachers of physics, mathematics and computer science. It was established that at the current stage of informatization of education, interdisciplinary knowledge, new information technologies and the ability to use them in the educational process occupy an important place. The preparation of a modern specialist capable of lifelong learning is impossible without the ability to apply scientific methods of cognition in the educational process, to carry out integrated training of students. It is established that the development of physics and other sciences takes place in close unity with the development of the modeling method. Modeling in the educational process simultaneously acts as a method of scientific knowledge, is part of the content of the educational material of various disciplines (subjects) and an effective means of their study. The role of the modeling method in the science and educational process has especially increased with the advent of computer models. Using models that are implemented with the help of software, the researcher can change the relevant parameters of the object under study, establish functional dependencies between the relevant values, etc. At the same time, in order to master modeling as a method of scientific knowledge, it is not enough for a student (pupil) to familiarize himself with the concepts of model and modeling, to conduct research using computer models. It is necessary that students (pupils) be involved in the process of creating computer models. This will allow students (pupils) to familiarize themselves with the stages of building computer models, to better understand the essence of the logical relationship between the original and the computer model. It has been established that one of the tools for creating computer models in the Java programming language is the JavaFX technology. It allows you to create applications using visual effects, image transformation and animation, a declarative way of describing the interface using the FXML markup language, styling the interface using CSS, etc. The process of creating a computer model based on JavaFX is illustrated in the laboratory work "Movement of gas molecules under the influence of gravity", which students perform while studying the course "Modeling of physical phenomena and processes".

Key words: JavaFX, information competence, simulation, computer simulation, computer model.

Актуальність проблеми. Становлення сучасної системи освіти неможливе без підготовки для неї спеціалістів нового покоління – вчителів, здатних у своїй практичній діяльності реалізувати нову освітню парадигму. Безперерв-

ний професійний розвиток учителя тісно пов'язаний із його здатністю використовувати інновації у професійній діяльності, умінням застосовувати наукові методи пізнання в освітньому процесі, здатністю здійснювати інтегро-

ване навчання учнів. Інструментом забезпечення успіху нової української школи має стати наскрізне застосування в освітньому процесі інформаційно-комунікаційних технологій, які суттєво розширяють можливості педагога щодо формування в учня важливих для нашого сторіччя інформаційних компетентностей. Важливою складовою інформаційної компетентності вчителя є його здатність будувати інформаційні моделі й досліджувати їх за допомогою засобів інформаційно-комунікаційних технологій. Учитель має формувати в учнів інформаційну компетентність, яка у галузі «Природничі науки» передбачає здатність ідентифікувати (розпізнати) та побудувати адекватні форми й моделі (схеми) довколишньої дійсності, розробляти гіпотези й перевіряти їхню достовірність шляхом дослідження, експериментування й апробації (Овчарук, 2004, с. 23). Розв'язання цієї проблеми важко уявити без використання в освітньому процесі методу моделювання, оскільки сам процес формування знань пов'язаний із перетворенням у свідомості учня (студента) одних моделей в інші, які є похідними від перших, але точнішими, з більшим наближенням до абсолютної істини (Калапуша, 2007, с. 4).

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Проблемі підготовки майбутніх вчителів фізики, математики та інформатики із застосуванням комп'ютерного моделювання присвячено дослідження С. Семерікова, А. Аданнікова, Р. Горбатюка, М. М'ястковської та ін. У дослідженнях П. Афанасьєва, Ю. Галатюка, Л. Калапуші, Ю. Коварського, Ю. Саурова, В. Фоменка, Д. Шодієва досліджено застосування моделей в освітньому процесі з фізики. Аналіз вітчизняних та зарубіжних досліджень показує, що на сучасному етапі інформатизації освіти на перше місце виступають саме загальнотеоретичні, фундаментальні та міждисциплінарні знання, а не технологічні, утилітарні знання та вміння із застосування нових інформаційних технологій в освітньому процесі. Ми поділяємо думку С. Семерікова про те, що фундаменталізація предметної підготовки майбутніх вчителів інформатики та фахівців у галузі інформаційних технологій є актуальною задачею сучасної вищої освіти, оскільки однією з основних особливостей інформаційного суспільства є той факт, що в ньому «покоління речей та ідей змінюються швидше, ніж покоління людей» (Семе-

ріков, 2009, с. 13). Ми згодні з Р. Горбатюком, що впровадження комп'ютерного моделювання у підготовку майбутніх фахівців є важливим чинником підвищення ефективності освітнього процесу у вищій школі. Дослідник вважає, що у процесі вивчення дисциплін із застосуванням імітаційного комп'ютерного моделювання студенти виступають суб'єктами пізнання явищ, процесів і законів природи та технологічних систем (Горбатюк, 2015). М. М'ястковська розглядає комп'ютерне моделювання як ефективний метод посилення міждисциплінарних зв'язків. На її думку, вивчення майбутніми вчителями математики та інформатики навчальної дисципліни «Основи комп'ютерного моделювання» сприяє формуванню у студентів дослідницьких вмінь, необхідних в їхній майбутній професійній діяльності, удосконаленню навичок використання програмних засобів для створення комп'ютерних моделей, поглибленню знань програмного матеріалу з математичних, фізичних та інформаційних дисциплін (М'ястковська, 2014).

Метою статті є дослідження проблеми підвищення ефективності освітнього процесу шляхом упровадження комп'ютерного моделювання у професійну підготовку майбутніх вчителів фізики, математики та інформатики.

Виклад основного матеріалу дослідження. Як відомо, у процесі пізнання і практичної діяльності людина широко застосовує різноманітні моделі. Створення і дослідження моделей позначається одним словом – моделювання. Основний зміст моделювання полягає в тому, щоб на результатами дослідів із моделями можна отримати потрібну інформацію про досліджуваний об'єкт, безпосереднє вивчення якого становить значні труднощі або зовсім неможливе. У наукових дослідженнях сфера застосування моделей також досить широка й багатогранна. Математика й логіка, фізика й хімія, астрономія і біологія, економіка й лінгвістика, дослідження процесів мислення та побудова на цій основі сучасних комп'ютерних систем – такий далеко не повний перелік головних напрямів використання різноманітних моделей у науці (Калапуша, 2007, с. 6).

Усі моделі, які використовує людина у процесі пізнання і практичній діяльності, можна поділити на два великі класи залежно від того, якими засобами здійснюється моделювання: а) матеріальні (речові) моделі; мислені

(ідеальні) моделі. До першого класу належать моделі, які зібрані з речових елементів, змонтованих у реально функціонуючий агрегат. Другий клас – це мислені моделі, що складаються з наочно поданих або логічно осмислених елементів, між якими існують відповідні закономірні зв'язки. Кожен із цих класів моделей можна поділити ще на кілька видів. Матеріальні моделі, а отже й матеріальне моделювання, поділяють на натурне, фізичне й математичне. За останні кілька десятиліть появилися нові математичні моделі, які назвали комп'ютерними. Комп'ютерна модель – це модель, яка реалізована за допомогою програмних засобів. Вона поєднує в собі властивості матеріального та мисленого математичного моделювання (Калапуша, 2007, с. 12). Комп'ютерні моделі зазвичай розрізняють за програмним забезпеченням, яке застосовується під час роботи з моделлю. Для обробки комп'ютерних моделей використовуються існуючі програмні засоби (математичні пакети, електронні таблиці, графічні редактори тощо) або розробляються оригінальні програми за допомогою мов програмування (C++, Java, Python, Delphi тощо).

Виходячи з актуальності застосування комп'ютерних моделей у науці й освітньому процесі в навчальний план підготовки бакалаврів за спеціальністю 014 Середня освіта (Фізика) у Волинському національному університеті імені Лесі Українки введено курс «Моделювання фізичних явищ і процесів». Він охоплює два змістові модулі: «Моделювання. Основи розробки додатків на мові Java» та «Комп'ютерна графіка. Створення комп'ютерних моделей».

У першому модулі розкривають поняття «модель», розглядають класифікацію моделей, ознайомлюють студентів із комп'ютерним моделюванням, розкривають суть комп'ютерного експерименту, формують вимоги до моделей, ознайомлюють із етапами побудови та дослідження моделі. Проводять огляд засобів моделювання, ознайомлюють із основами програмування на мові Java, розкривають можливості технології JavaFX для розробки настільних і мережевих додатків.

У другому модулі ознайомлюють студентів із графічними можливостями JavaFX. Розглядають компоненти відображення графічної інформації, зв'язок між натуральними координатами точки та координатами на екрані.

Важливою умовою формування професійних компетенцій, що дозволяють самостійно формувати навички комплексного застосування технології JavaFX до вирішення прикладних завдань у професійній діяльності, є лабораторний практикум з комп'ютерного моделювання фізичних явищ і процесів.

Для створення комп'ютерних моделей використовується мова програмування Java та її платформа JavaFX. Вона дозволяє розробникам проектувати, створювати, тестувати, налагоджувати і розгортати насичені клієнтські додатки як для вбудованих, так і для настільних систем. JavaFX-додаток містить форми та елементи керування. Для опису компоновки елементів управління в JavaFX застосовується мова розмітки FXML. Файли FXML-документів можна створити вручну або за допомогою інструментального засобу Scene Builder. Зовнішній вигляд інтерфейсу користувача можна змінити із застосуванням таблиць стилів CSS (Машнін, 2012).

Розглянемо можливості технології JavaFX на прикладі лабораторної роботи «Рух молекул газу під дією сили тяжіння», яку студенти виконують у межах вивчення курсу «Моделювання фізичних явищ і процесів». Перед її виконанням студенти ознайомлюються із основними етапами розробки JavaFX-додатків із використанням конструктора макетів Scene Builder, створюють проєкт *model* і головну форму графічних побудов (Муляр, 2020).

Лабораторна робота. Рух молекул газу під дією сили тяжіння

Мета: ознайомитися з методом опису стану системи матеріальних точок на прикладі програми моделювання руху молекул газу в прямокутній посудині, яка розміщена в однорідному гравітаційному полі.

Приклад створення додатку

Завдання. Задано систему, яка складається з N матеріальних точок із масами m_i ($i = 1, 2, \dots, N$), які взаємодіють одна з одною внутрішніми силами. На кожну з них діє зовнішня сила. За початковими координатами x_i , y_i та швидкостями v_{xi} , v_{yi} визначте координати та швидкості матеріальних точок у наступні моменти часу. Побудуйте комп'ютерну модель, яка ілюструє рух молекул газу.

Розв'язання. Розглянемо механічну систему, яка складається з N матеріальних точок масами m_1, m_2, \dots, m_N . Основний закон динаміки:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i + \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij}, \quad i = 1, \dots, N,$$

де F_{ij} – внутрішня сила, що діє на i -у матеріальну точку з боку j -ї матеріальної точки; F_i – рівнодійна зовнішніх сил, що діють на i -у матеріальну точку з боку тіл, які не входять у систему.

Диференціальне рівняння другого порядку може бути представлено двома диференціальними рівняннями першого порядку. Маємо:

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{a}_i, \quad \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i,$$

$$\vec{a}_i = \frac{1}{m_i} \left(\vec{F}_i + \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij} \right), \quad i = 1, \dots, N.$$

Знаючи зовнішні та внутрішні сили, які діють на кожен матеріальну точку, можна визначити їхнє прискорення. За координатами і швидкостями точки в момент часу t можна розрахувати координати та швидкості точки в наступний момент часу $t + \Delta t$.

Оскільки будь-яка механічна система – це сукупність взаємодіючих матеріальних точок, то ця модель широко використовується у фізиці й охоплює велику кількість механічних систем. Крім моделювання одновимірного та двовимірного руху матеріальної точки, цей метод дає змогу вивчити рух двох частинок, які притягуються або відштовхуються, абсолютно пружний і непружний центральні удари, абсолютно пружний і непружний нецентральні удари, рух частинки в центрально-симетричному полі іншої частинки, рух молекул газу, дифузія, рух планет навколо Сонця, рух взаємодіючих частинок в однорідному полі, рух взаємодіючих частинок у центрально-симетричному полі.

Побудуємо алгоритм моделі.

1. Задають число матеріальних точок N , їх маси m_i , координати x_i, y_i та проекції початкових швидкостей v_{ix}, v_{iy} , силове поле $F_x = F_x(x, y)$, $F_y = F_y(x, y)$, а також крок за часом Δt .

2. Початок циклу за t . Надають приріст за часом: змінній t привласнюють значення $t + \Delta t$.

3. Визначають проекції F_{xi}, F_{yi} рівнодійної всіх зовнішніх і внутрішніх сил, які діють на кожен i -у матеріальну точку в момент $t + \Delta t$, і записують їх у масиви.

4. У циклі визначають координати всіх матеріальних точок, записуючи їх у масиви $xx[i], yy[i]$.

5. У циклі перебирають усі матеріальні точки й визначають проекції прискорення, швидкості та координати для кожної з них у момент $t + \Delta t$:

$$a_{xi}(t + \Delta t) = \frac{F_{xi}(t + \Delta t)}{m_i},$$

$$v_{xi}(t + \Delta t) = v_{xi}(t) + a_{xi}(t + \Delta t) \cdot \Delta t,$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + v_{xi}(t + \Delta t) \cdot \Delta t.$$

За аналогічними формулами обчислюють проекції на вісь OY . Результати записують у масиви $x[i], y[i], vx[i], vy[i]$.

6. Стирають зображення матеріальних точок у попередній момент часу t , координати яких збережені в масивах $xx[i], yy[i]$.

7. На екрані будують точки в наступний момент $t + \Delta t$, або рисують графіки чи виводять результат у числовому вигляді.

8. Повернення до операції 2. Якщо цикл за t закінчився – вихід із циклу.

Нижче наведено код програми, яка моделює рух 50 молекул газу в прямокутній посудині, яка знаходиться в однорідному гравітаційному полі.

Розміщення компонентів на формі й створення обробників подій

1. Відкрийте проєкт *model*. У меню *Файл* виберіть *Створити файл | JavaFX | Empty FXML*, натисніть кнопку *Далі*. Дайте назву FXML-файлу *FXMLGas*, натисніть кнопку *Далі*. Встановіть прапорець *Use Java Controller* і натисніть кнопку *Далі*. Натисніть кнопку *Готово*. В результаті середовищем *NetBeans* буде згенеровано два файли – *FXMLGas.fxml* і *FXMLGasController.java*.

2. Відкрийте файл *FXMLGasController.java*. Встановіть, що клас *FXMLGasController* є розширенням класу *FXMLAllController*:

```
public class FXMLGasController extends FXMLAllController implements Initializable
```

3. Відкрийте файл *FXMLGas.fxml* у середовищі *JavaFX Scene Builder*. У меню *File* виберіть *Import | FXML*, виберіть зі списку файл *FXMLAll.fxml* і натисніть кнопку *Відкрити*. Змініть макет FXML-файлу як показано на рис. 1.

4. У меню *View* виберіть *Show Sample Controller Skeleton*. Виберіть у вікні діалогу наступний текст.

```
@FXML
private Button buttonMainPane;
@FXML
private Button buttonStart;
```

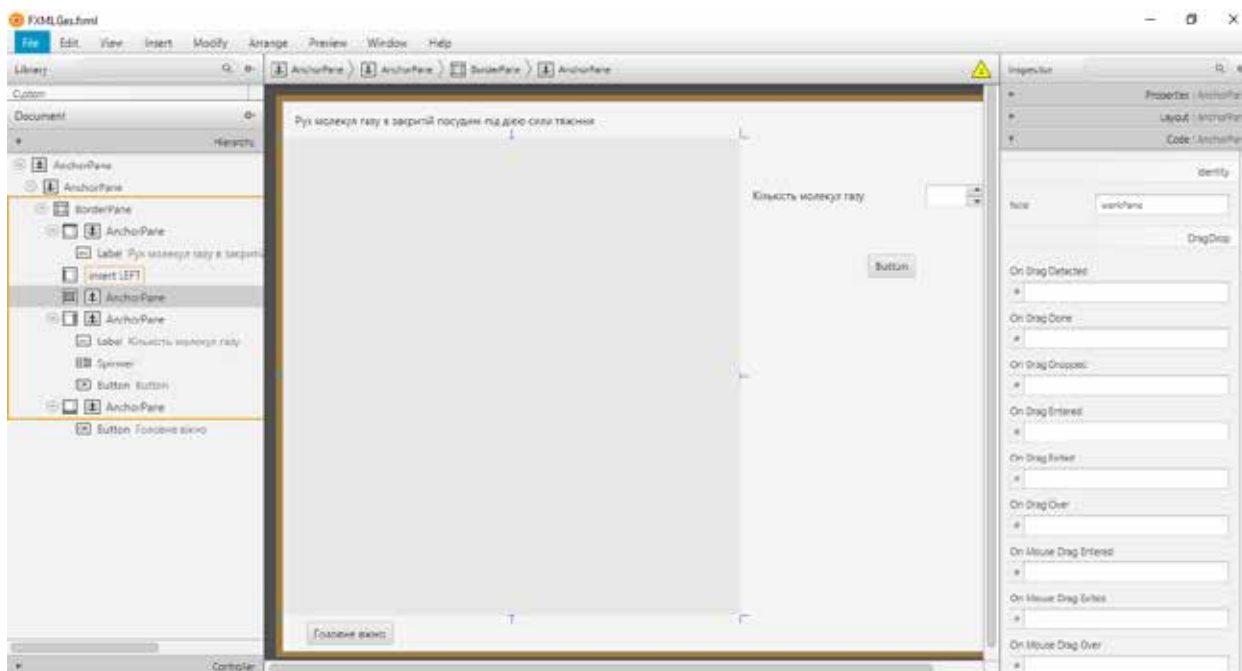


Рис. 1. Макет файлу FXMLGas.fxml у середовищі JavaFX Scene Builder

```
@FXML
private Spinner<?> spinner1;
@FXML
void buttonMainPaneOnAction(ActionEvent
event) {
}
@FXML
void buttonStartOnAction(ActionEvent event) {
}
```

Вставте виділений код в *public class FXMLGasController extends FXMLAllController implements Initializable { ...}*. Далі замініть *Spinner<?>* на *Spinner<Integer>* для змінної *spinner1*.

5. Відкрийте файл *FXMLModel.fxml* у середовищі *JavaFX Scene Builder*. Додайте в меню «Модель» *MenuItem* «Рух молекул газу під дією сили тяжіння». Далі перейдіть на вкладку *Code* і для цього компонента в полі *fx:id* установіть значення *menuItemGas*, а в полі *On Action* задайте значення *menuItemGasOnAction*.

У меню *View* виберіть *Show Sample Controller Skeleton*. У вікні діалогу виберіть наступний текст.

```
@FXML
private MenuItem menuItemGas;
@FXML
void menuItemGasOnAction(ActionEvent
event) {
}
```

Перейдіть у файл *FXMLModelController.java*. Вставте виділений код в *public class FXMLModelController extends FXMLAllController implements Initializable { ...}*. Далі помістіть у метод *menuItemGasOnAction* наступний код.

```
root.getChildren().clear();
root.getChildren().add((AnchorPane)
FXMLLoader.load(getClass().
getResource("FXMLGas.fxml")));
```

6. Поверніться у файл *FXMLGasController.java*. Внесіть зміни в метод *buttonMainPaneOnAction* за наведеним нижче.

```
@FXML
void buttonMainPaneOnAction(ActionEvent
event) throws IOException {
root.getChildren().clear();
root.getChildren().add((AnchorPane)
FXMLLoader.load(getClass().
getResource("FXMLModel.fxml")));
}
```

7. Додайте в *public void initialize(URL url, ResourceBundle rb) { ...}* наступний код.

```
SpinnerValueFactory<Integer> valueFactory1
=
new SpinnerValueFactory.
IntegerSpinnerValueFactory(40, 60, 50);
spinner1.setValueFactory(valueFactory1); //
кількість молекул газу
```

```
bottomPane.toFront();
bottomPane.setLayoutY(root.getPrefHeight()-
bottomPane.getPrefHeight());
rightPane.toFront();
rightPane.setLayoutX(root.getPrefWidth()-
rightPane.getPrefWidth());
```

8. Додайте в `public class FXMLGasController` extends `FXMLAllController` implements `Initializable` {...} наступний код.

```
private final double r = 2;
private final double dt = 0.01;
double[] m = new double[200];
double[] Fx = new double[200];
double[] Fy = new double[200];
double[] x = new double[200];
double[] y = new double[200];
double[] vx = new double[200];
double[] vy = new double[200];
double[] xx = new double[200];
double[] yy = new double[200];
Circle[] circle = new Circle[50];
int N, i, j;
double ax, ay, F, l;
// Функція Forces()
void Forces(){
for (i = 0; i < N; i++){
Fx[i] = 0;
Fy[i] = 0;
}
for (i = 0; i < N; i++){
for (j = 1; j < N; j++){
if (j != i){
l = Math.sqrt(Math.pow((x[i] - x[j]), 2) + Math.
pow((y[i] - y[j]), 2));
if (l < r) l = r;
F = -50000 * m[i] * m[j] / Math.pow(l, 2) +
500000 * m[i] * m[j] / Math.pow(l * l, 2);
Fx[i] = Fx[i] + F * (x[i] - x[j]) / l;
Fy[i] = Fy[i] + F * (y[i] - y[j]) / l + m[i] * 10;
}}}
```

9. Вставте в метод `void buttonStartOnAction(ActionEvent event)` наступний код.

```
workPane.getChildren().clear();
N = spinner1.getValue(); // кількість молекул
газу
// Початкові умови
for (i = 0; i < N; i++){
m[i] = 2;
x[i] = r+Math.random()*(workPane.
getPrefWidth()-r);
```

```
y[i] = r+Math.random()*(workPane.
getPrefHeight()-r);
vy[i] = Math.random()*30 - 30;
vx[i] = Math.random()*30 - 30;
}
```

```
// Створення масиву молекул газу
for (i=0; i<N; i++){
circle[i] = new Circle();
circle[i].setRadius(r);
circle[i].setCenterX(x[i]);
circle[i].setCenterY(y[i]);
circle[i].setVisible(false);
workPane.getChildren().add(circle[i]);
}
```

```
//Анімація руху молекул
Timeline timeline = new Timeline(
new KeyFrame(Duration.seconds(0),e -> {
Forces(); // Обчислюємо сили (Forces)
for (i = 0; i < N; i++){
xx[i] = x[i];
yy[i] = y[i];
ax = Fx[i] / m[i];
ay = Fy[i] / m[i];
vx[i] = vx[i] + ax * dt;
vy[i] = vy[i] + ay * dt;
x[i] = x[i] + vx[i] * dt;
y[i] = y[i] + vy[i] * dt;
if ((x[i] < r) || (x[i] > workPane.getPrefWidth()
- r)) vx[i] = -vx[i];
if ((y[i] < r) || (y[i] > workPane.getPrefHeight()
- r)) vy[i] = -vy[i];
}
for (i=0; i<N; i++){
circle[i].setCenterX(x[i]);
circle[i].setCenterY(y[i]);
circle[i].setVisible(true);
}
}),
new KeyFrame(Duration.seconds(0.05),e -> {
for (i=0; i<N; i++){
circle[i].setCenterX(xx[i]);
circle[i].setCenterY(yy[i]);
circle[i].setVisible(false);
}
}
});
```

```
timeline.setCycleCount(Animation.
INDEFINITE);
timeline.play();
```

10. Збережіть і виконайте проєкт. Виберіть `Модель | Рух молекул газу під дією сили тяжіння` і на екрані з'явиться вікно як наведено нижче.

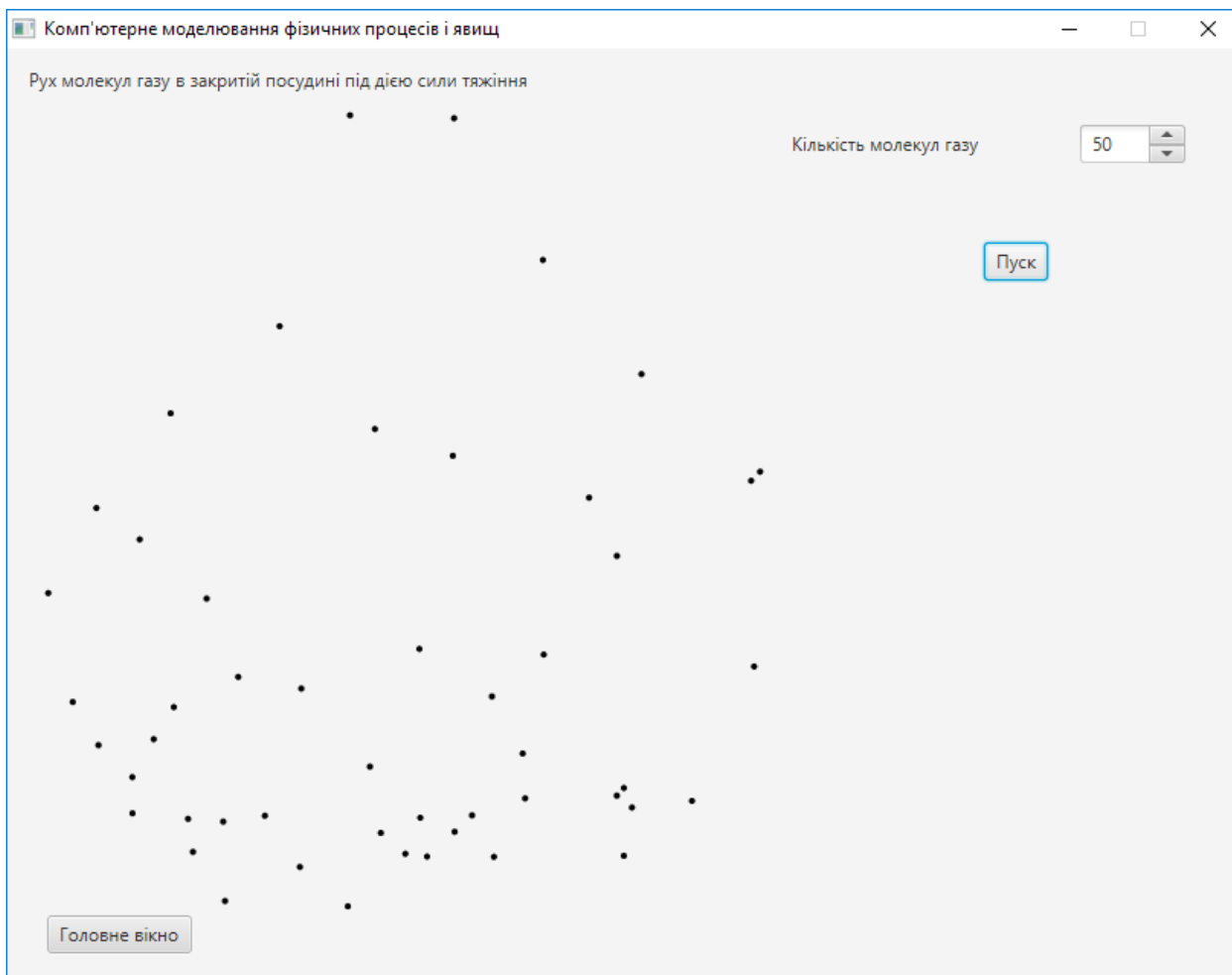


Рис. 2. Модель «Рух молекул газу під дією сили тяжіння»

У процесі виконання лабораторної роботи студенти ознайомлюються з основними етапами створення комп'ютерних моделей, основами проєктування та розробки користувацьких інтерфейсів засобами JavaFX із використанням сучасних інтегрованих середовищ програмування.

Висновки і перспективи подальших досліджень. Якісна підготовка фахівців потребує творчого підходу викладачів закладів вищої освіти до вибору змісту, форм, методів і засобів навчання, максимального використання досягнень сучасної інформаційних та освітніх технологій. Останні мають бути орієнтованими на оволодіння систем-

ним знанням та формування цілісної природничо-наукової та інформаційної картини світу. Генезис методу моделювання нерозривно пов'язаний з розвитком як фізики так і інших наук, тому цей метод є невід'ємним складником змісту освітніх компонент у вищій та середній школі. Ознайомлення студентів із елементами теорії моделювання дасть їм можливість осмислити суть поняття «модель», зрозуміти зміст методу моделювання, формуватиме здатність будувати та досліджувати моделі, в т. ч. і комп'ютерні. А це, в свою чергу, сприятиме підвищенню рівня підготовки майбутніх вчителів фізики, математики та інформатики.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Горбатюк Р.М. Комп'ютерне моделювання у підготовці фахівців з вищою освітою. *Ukrainian Journal of Educational Studies and Information Technology*. 2015. Vol. 1. С. 33–42.
2. Калапуша Л.Р., Муляр В.П., Федонюк А.А. Комп'ютерне моделювання фізичних явищ і процесів : навч. посіб. для студ. вищих навч. закл. Луцьк : РВВ «Волин. нац. ун-ту ім. Лесі Українки», 2007. 192 с.
3. Компетентнісний підхід у сучасній освіті: світовий досвід та українські перспективи: Бібліотека з освітньої політики. Під ред. О.В. Овчарук. К. : К. І. С., 2004. 112 с.

4. Машнин Т.С. JavaFX 2.0: разработка RIA-приложений. СПб. : БХВ-Петербург, 2012. 320 с.
5. Муляр В.П. Розробка JavaFX-додатків із використанням Scene Builder. *Комп'ютерно-інтегровані технології : освіта, наука, виробництво*. Луцьк, 2020. Вип. № 39. С. 181–189.
6. Мясковська М.О. Комп'ютерне моделювання як ефективний метод посилення міждисциплінарних зв'язків. *Збірник наукових праць Кам'янець-Подільського національного університету імені Івана Огієнка*. Серія : Педагогічна. 2014. Вип. 20. С. 289–291.
7. Семеріков С.О. Фундаменталізація навчання інформатичних дисциплін у вищій школі: Монографія. *Наук. ред. академік АПН України, д. пед. н., проф. М.І. Жалдак. Кривий Ріг : Мінерал; К. : НПУ ім. М.П. Драгоманова, 2009. 340 с.*

REFERENCES:

1. Horbatiuk, R.M. (2015) Kompiuterne modeliuвання u pidhotovtsi fakhivtsiv z vyshchoiu osvitoiu [Computer modeling for training specialists with higher education]. *Ukrainian Journal of Educational Studies and Information Technology*. 1. 33–42 [in Ukrainian].
2. Kalapusha, L.R., Muljar, V.P., Fedonjuk, A.A. (2007) Komp'juterne modeljuвання fizychnykh javyshh i procesiv [Computer modeling of physical phenomena and processes]: navch. posib. dlja stud. vyshhykh navch. zakl. Lucjk: RVV «Vezha» Volyn. nac. un-tu im. Lesi Ukrajinjky [in Ukrainian].
3. Kompetentnisnyj pidkhd u suchasnj osviti: svitovyj dosvid ta ukrajinsjki perspektyvy [Competency approach in modern education: world experience and Ukrainian perspectives]: Biblioteka z osvithoji polityky (2004). Pid red. O.V. Ovcharuk. K.: K.I.S. [in Ukrainian].
4. Mashnyn, T.S. (2012) JavaFX 2.0: razrobotka RIA-prylozheni [JavaFX 2.0: Developing RIA Applications]. SPb.: BKhV-Peterburh [in Ukrainian].
5. Mular, V.P. (2020) Rozrobka JavaFX-dodatkov iz vykorystanniam Scene Builder [Development of JavaFX applications using Scene Builder]. *Kompiuterno-intehrovani tekhnologii: osvita, nauka, vyrobnytstvo*. Lutsk. 39. 181–189 [in Ukrainian].
6. Miastkovska, M.O. (2014) Kompiuterne modeliuвання yak efektyvnyi metod posylennia mizhdystyplinarnykh zviazkiv [Computer modeling as an effective method of strengthening interdisciplinary connections]. *Zbirnyk naukovykh prats Kamianets-Podilskoho natsionalnoho universytetu imeni Ivana Ohienka*. Serii: Pedagogichna. 20. 289–291 [in Ukrainian].
7. Semerikov, S.O. (2009) Fundamentalizatsiia navchannia informatychnykh dystsyplin u vyshchii shkoli [Fundamentalization of the teaching of informatics disciplines in higher education]: Monohrafiia. Nauk. red. akademik APN Ukrainy, d. ped. n., prof. M.I. Zhaldak. Kryvyi Rih: Mineral; K.: NPU im. M.P. Drahomanova [in Ukrainian].

ЗМІСТ

Ігор ВЕРГУН ОРГАНІЗАЦІЯ ПЕДАГОГІЧНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ З УПРОВАДЖЕННЯ МЕТОДИКИ НАВЧАННЯ ФІЗИКИ НА ЗАСАДАХ БІЛІНГВАЛЬНОГО ПІДХОДУ.....	3
Оксана ЗАМУРУЄВА ВЛАСТИВОСТІ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ ГРУПИ $A^IVB^{III}C_2^{VI}$	9
Andrey ZINOVCHUK, Dmitrij STEPANCHIKOV, Regina VASILEVA IDEALITY FACTOR IN INGAN/GAN MULTIPLE QUANTUM WELL LIGHT-EMITTING DIODES WITH NONUNIFORM CURRENT SPREADING.....	16
Галина МИРОНЧУК, Олександр ЯНЧУК, Олег МАРЧУК, Юрій ХМАРУК, Олексій ВИШНЕВСЬКИЙ, Ірина МОРОЗ, Ярослав ЄНДРИКА, Катаржина ОЗГА, Артур ВОЙЦЕХОВСЬКИ ВПЛИВ УМОВ СИНТЕЗУ НА ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК CDS.....	24
Микола САДОВИЙ, Олена ТРИФОНОВА МЕТОДОЛОГІЧНИЙ ПІДХІД У НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ ПРИ ПІДГОТОВЦІ КВАЛІФІКАЦІЙНИХ РОБІТ СТУДЕНТАМИ ПРИРОДНИЧОЇ, ТЕХНОЛОГІЧНОЇ ТА ПРОФЕСІЙНОЇ ГАЛУЗЕЙ ОСВІТИ.....	31
Людмила СОЛЯНИК РЕАКЦІЇ ЕЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСУ НА МІЖФАЗОВІЙ МЕЖІ ПОВЕРХНЯ ТВЕРДОГО ТІЛА-РОЗТОП ПРИ СИНТЕЗІ НАНОМАТЕРІАЛІВ В УМОВАХ КАТІОННОГО КАТАЛІЗУ.....	39
Petro TROKHIMCHUCK TO QUESTION ABOUT NATURE AND MODELLING THE OPTICAL-INDUCED CHERENKOV RADIATION.....	44
Тетяна ЯЦИНЮК, Андрій КЕВШИН, Володимир ГАЛЯН, Інна ІВАЩЕНКО, Віталій АРТЮХ, Костянтин МЕЛЬНИЧУК, Дмитро ІВАНЮК ВПЛИВ ДЕФЕКТІВ І ДОМІШОК НА СТРУКТУРУ ТА ВЛАСТИВОСТІ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ.....	54
Вадим МУЛЯР, Світлана ЯЦЮК, Валентина ЮНЧИК КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ПІДГОТОВЦІ МАЙБУТНІХ ВЧИТЕЛІВ ФІЗИКИ, МАТЕМАТИКИ ТА ІНФОРМАТИКИ.....	61

CONTENTS

Ihor VERHUN

ORGANIZATION OF A PEDAGOGICAL EXPERIMENT ON THE IMPLEMENTATION OF THE METHODOLOGY OF TEACHING PHYSICS ON THE BASIS OF A BILINGUAL APPROACH.....3

Oksana ZAMURUEVA

PROPERTIES OF CHALCOGENIDE SEMICONDUCTORS OF GROUP A^{IV}B^{III}C₂^{VI}.....9

Andrey ZINOVCHUK, Dmitrij STEPANCHIKOV, Regina VASILEVA

IDEALITY FACTOR IN INGAN/GAN MULTIPLE QUANTUM WELL LIGHT-EMITTING DIODES WITH NONUNIFORM CURRENT SPREADING.....16

Galyna MYRONCHUK, Oleksandr YANCHUK, Oleg MARCHUK, Yurii KHMARUK, Oleksii VYSHNEVSKYI, Iryna MOROZ, Jaroslaw JEDRYKA, Katarzyna OZGA, Artur WOJCIECHOWSKI

INFLUENCE OF SYNTHESIS CONDITIONS ON THE PROPERTIES OF CDS NANOPARTICLES.....24

Mykola SADOVYI, Olena TRYFONOVA

METHODOLOGICAL APPROACH IN SCIENTIFIC RESEARCH DURING THE PREPARATION OF QUALIFICATION PAPERS BY STUDENTS OF NATURAL, TECHNOLOGICAL AND PROFESSIONAL FIELDS OF EDUCATION..... 31

Ludmila SOLYANIK

ELECTRON TRANSFER REACTIONS AT THE INTERPHASE BOUNDARY OF THE SURFACE OF A SOLID-MELTING DURING THE SYNTHESIS OF NANOMATERIALS UNDER THE CONDITIONS OF CATIONIC CATALYSIS.....39

Petro TROKHIMCHUCK

TO QUESTION ABOUT NATURE AND MODELLING THE OPTICAL-INDUCED CHERENKOV RADIATION..... 44

Tetiana YATSYNIUK, Andriy KEVSHYN, Volodymyr HALYAN, Inna IVASHCHENKO, Vitalii ARTIUKH, Kostiantyn MELNYCHUK, Dmytro IVANIUK

INFLUENCE OF DEFECTS AND IMPURITIES ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF CHALCOGENED SEMICONDUCTORS..... 54

Vadym MULIAR, Svitlana YATSIUK, Valentina YUNCHYK

COMPUTER SIMULATION IN THE TRAINING OF FUTURE TEACHERS OF PHYSICS, MATHEMATICS AND INFORMATICS.....61

ФІЗИКА ТА ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

Випуск 2

Коректура • Ірина Миколаївна Чудеснова

Комп'ютерна верстка • Наталія Сергіївна Кузнецова

Формат 60x84/8. Гарнітура Times New Roman.

Папір офсет. Цифровий друк. Ум. друк. арк. 8,37. Замов. № 0123/0129. Наклад 300 прим.

Видавництво і друкарня – Видавничий дім «Гельветика»

65101, Україна, м. Одеса, вул. Інглезі, 6/1

Телефон +38 (095) 934 48 28, +38 (097) 723 06 08

E-mail: mailbox@helvetica.ua

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 7623 від 22.06.2022 р.