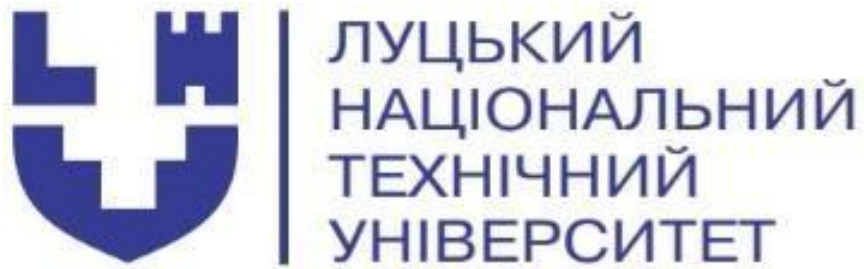


Міністерство освіти і науки України



МАТЕРІАЛИ

VIII МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
**«ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА: СТАН, ДОСЯГНЕННЯ ТА
ПЕРСПЕКТИВИ»**

18-19 жовтня 2024 р.



Луцьк – 2024

УДК 53.096+54-14(082)

Ф-48

*Рекомендовано до друку науково-технічною радою Луцького національного
технічного університету.*

Протокол № 3 від 22.10.2024 р.

Ф-48 ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА: СТАН, ДОСЯГНЕННЯ ТА
ПЕРСПЕКТИВИ: Матеріали VIII Міжнародної науково-
практичної конференції, 18-19 жовтня 2024 р., м. Луцьк. Луцьк:
ІВВ ЛНТУ, 2024. 208 с.

У збірнику представлені тези доповідей учасників VIII Міжнародної науково-практичної конференції. Наведено фізико-хімічні властивості та структуру нових матеріалів, проаналізовано фізичні та хімічні методи дослідження і технології, розглянуто проблемні питання мікро- та нано-електроніки, математичної фізики. Завершують збірник роботи, присвячені методології навчання фундаментальних дисциплін у вищій школі.

Матеріали наведено у авторській редакції.

© Автори статей, 2024

Секція 1. Фізико-хімічні властивості та структура матеріалів

УДК 535.36

ФОТОІНДУКОВАНЕ ОКИСЛЕННЯ ПОВЕРХНІ СКЛА $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Ag}$ ПІД ДІЄЮ ВИДИМОГО СВІТЛА

Ю. М. Ажнюк¹, В. В. Лопушанський¹, А. І. Погодін², М. Й. Філеп^{2,3}, В. О. Юхимчук⁴,
В. М. Кришеник¹, І. М. Войнарович¹, О. В. Гомоннай¹

¹ Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21,
Ужгород 88017, Україна, e-mail: yu.azhniuk@gmail.com

² Ужгородський національний університет, пл. Народна, 3,
Ужгород 88000, Україна

³ Закарпатський угорський інститут ім. Ференца Ракоці II, пл. Кошута, 6,
Берегово 90200, Україна

⁴ Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,
просп. Науки, 45, Київ 03028, Україна

Фотоіндуковані структурні зміни в аморфному As_2S_3 створюють можливості для його використання в ряді галузей оптики й оптоелектроніки. При опроміненні аморфного As_2S_3 ультрафіолетовим (УФ) світлом на його поверхні можуть відбуватися фотохімічні реакції, зокрема фотоокислення, про що, зокрема, свідчать дані раманівської спектроскопії [1].

Нами досліджено можливість фотоокислення $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Ag}$ під дією видимого світла. При цьому раманівську спектроскопію використано і для забезпечення джерела освітлення, і як метод виявлення продуктів реакції окислення.

Скла $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Ag}$ з вмістом Ag до 10 ат. % отримано сплавленням попередньо синтезованого As_2S_3 та колоїдного срібла при 600 °C у вакуумованих кварцових ампулах при постійному помішуванні, витримкою при цій температурі впродовж 4 год та швидкому гартуванні на повітрі. Аморфну структуру зразків та відсутність кристалічних фаз підтверджено рентгенодифрактометричними вимірюваннями (Proto Manufacturing Ltd, детектор DECTRIS MYTHEN2R 1D, Cu K_α випромінювання, Ni фільтр). Вимірювання спектрів раманівського розсіювання проведено при 295 K на спектрометрі XPloRa Plus при збудженні лазером з $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм і густиною потужності P_{exc} від 0.4 до 100 кВт/см² та на спектрометрі МДР-23 з охолодженням CCD-детектором iDus 420 (Andor) при збудженні лазером з $\lambda_{\text{exc}}=671$ нм з $P_{\text{exc}} \leq 1$ кВт/см².

У раманівських спектрах склоподібних зразків $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Ag}$, отриманих при $\lambda_{\text{exc}}=671$ нм (рис.1а), а також при $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм з низькою $P_{\text{exc}}=4$ кВт/см² (рис.1б), подібно до нелегованого аморфного As_2S_3 , спостерігається широкий домінантний максимум поблизу 340 см⁻¹ (пов'язаний насамперед з коливаннями зв'язків As–S пірамід AsS_3 , а також з менш помітним внеском коливань інших структурних груп) та дві широкі менш інтенсивні смуги поблизу 180 см⁻¹ і 230 см⁻¹, що відповідають коливанням гомополярних зв'язків As–As.

При зростанні P_{exc} до 40 кВт/см² ($\lambda_{\text{exc}}=532$ нм) для зразків з вмістом Ag 6 % і 10 % спостерігається новий вузький пік біля 268 см⁻¹ (рис.1в). Такий пік характерний для коливання симетрії T_{2g} кристалічного As_2O_3 (арсеноліту) [2]. Фотоіндуковане окислення скла As_2S_3 при достатній інтенсивності світла з $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм веде до утворення кристалітів арсеноліту на поверхні зразка. Новий раманівський пік виникає у спектрах протягом кількох секунд, що вказує на високу швидкість фотоокислення. На відміну від нелегованого As_2S_3 , де лінії, пов'язані з As_2O_3 , з'являються під дією УФ випромінювання [1], у випадку $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Ag}$ пік біля 268 см⁻¹ виникає при опроміненні світлом набагато нижчої енергії.

У раманівських спектрах, виміряних при низькій $P_{\text{exc}}=4$ кВт/см² від тієї ж точки після опромінення зразка світлом з тією ж $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм і високою $P_{\text{exc}}=40$ кВт/см², вузький пік від As₂O₃ чітко проявляється на фоні широких максимумів аморфного As₂S₃. Це підтверджує

незворотний характер фотоокислення поверхні скла. При ще вищій густині потужності 100 кВт/см², крім обговорюваного піка, спостерігаються ще два вузькі піки біля 365 і 555 см⁻¹, теж відомі для кристалічного As₂O₃ [2], які також проявляються, коли арсеноліт утворюється під дією УФ випромінювання [1].

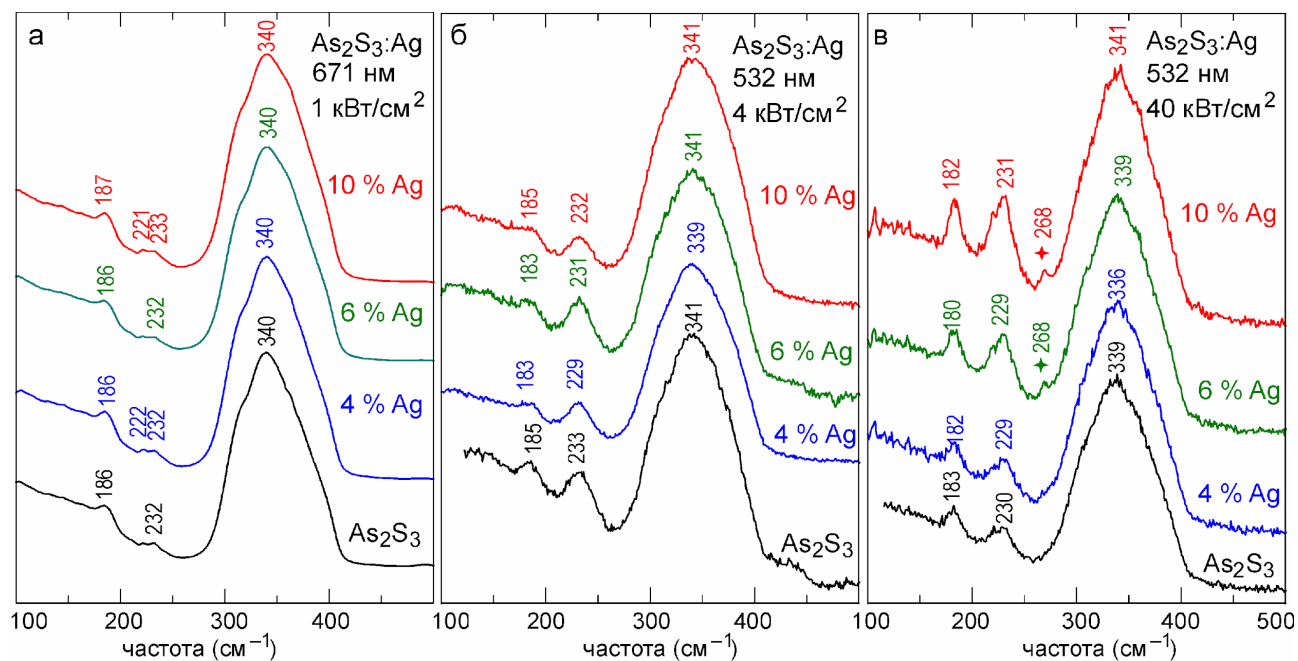


Рис. 1. Раманівські спектри зразків скла $\text{As}_2\text{S}_3\text{:Ag}$, виміряні при $\lambda_{\text{exc}}=671$ нм (а) і при $\lambda_{\text{exc}}=532$ нм (б, в). Зірочками позначено піки, пов'язані з As_2O_3 .

Утворення кристалітів As_2O_3 на поверхні скла As_2S_3 під дією інтенсивного УФ світла пояснюється термічним ефектом [1], коли світло поглинається переважно у верхньому шарі товщиною 0.05 мкм, що веде до значного (до 740 °C) нагрівання матеріалу. Висока температура сприяє розриву зв'язків у сітці скла з утворенням елементного As, його випаровуванню і взаємодії з киснем повітря, при цьому роль каталізатора відіграє водяна пара.

На відміну від нелегованого As_2S_3 , де фотоокислення відбувається під дією УФ випромінювання [1], для $\text{As}_2\text{S}_3:\text{Ag}$ ми спостерігаємо його під дією зеленого світла ($\lambda_{\text{exc}}=532$ нм), що має набагато нижчу енергію, при цьому нагрівання поверхневого шару за рахунок поглинання недостатньо для ініціювання реакції фотоокислення [1]. При легуванні As_2S_3 сріблом край поглинання дещо зсувається в червону область, однак недостатньо для того, щоб пояснити реакцію фотоокислення нагріванням просто за рахунок зростання поглинання. Тому розглядаються також інші механізми. Один з них пов'язаний з ослабленням зв'язків у структурній сітці скла за рахунок її перебудови при внесенні срібла подібно до того, як на процеси фотоокислення поверхні As_2S_3 впливає внесення Pb чи Bi. Інший механізм пов'язаний з можливим варіантом, коли частина срібла не вбудовувалась у структурну сітку скла, а залишилась у формі колоїдних наночастинок (не будучи виявленою на дифрактограмах через ультрамалі розміри). У такому разі взаємодія збуджуючого лазерного світла з наночастинами срібла може вести до додаткового розігрівання, сприяючи реакції фотоокислення As_2S_3 подібно до того, як взаємодія світла з ансамблем наночастинок металу сприяє явищу поверхнево підсиленого раманівського розсіювання.

Дослідження виконано за підтримки гранту № 2023.03/0013 програми "Передова наука в Україні" Національного фонду досліджень України.

1. Y. Azhniuk, D. Solonenko, V. Loya, I. Grytsyshche, V. Lopushansky, A. V. Gomonnai, D. R. T. Zahn, Appl. Surf. Sci. 467–468 (2019) 119–123. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.10.157>.
2. S.J. Gilliam, C.N. Merrow, S.J. Kirkby, J.O. Jensen, D. Zeroka, A. Banerjee, J. Solid State Chem. 173 (2003) 54–58. [https://doi.org/10.1016/S0022-4596\(03\)00082-3](https://doi.org/10.1016/S0022-4596(03)00082-3).

УДК 546.665'683'62+546+548.4+543.437.2.3

**ISOTHERMAL SECTION OF THE STATE DIAGRAM OF THE
Dy – Zn – Al SYSTEM AT 500 °C
I. Arseniuk, B. Stelmakhovich**

*Department of Analytical Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: ivankaarseniuk21@gmail.com*

The diagram of phase equilibria in the Dy – Zn – Al system at 500 °C has been studied by X-ray structural analysis and partially by X-ray spectroscopy. The synthesis of the samples was carried out by sintering: the powders of the starting components were compressed into tablets of 1-1.5 g, placed in corundum crucibles and heated in a tubular furnace in a stream of purified argon at a temperature of ~700 °C for 1 h. After cooling, the samples were thoroughly ground, recompressed into tablets and homogenised in corundum crucibles in argon-filled quartz ampoules at 500 °C for 500 h. The research was carried out using the methods of X-ray phase and X-ray structural analysis (powder diffractometers DRON-2.0 (Fe K α radiation), DRON-3M (Cu K α radiation) and STOE STADI P (Cu K α 1 radiation). X-ray spectral analysis was performed on an Elvax Pro X-ray fluorescence analyser. All calculations were performed using the WinCSD structural analysis software package [1].

The isothermal cross section of the state diagram at 500 °C of the Dy – Zn – Al system is shown in Fig. 1, the crystallographic properties of the compounds are given in Table 1.

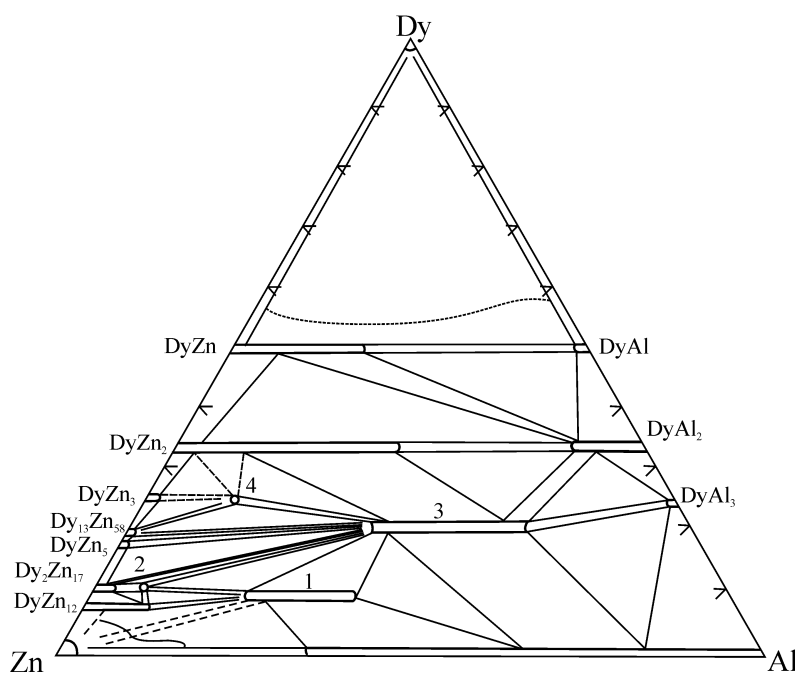


Fig. 1. Isothermal section of the state diagram of the Dy – Zn – Al system at 500 °C.

Table 1 - Crystallographic characteristics of compounds in the Dy – Zn – Al system

N	Phases	Structure type	Space group	Lattice parameters, Å		
				<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
*	DyZn _{12-x} Al _x (x=1.11)	ThMn ₁₂	<i>I4/mmm</i>	8.8818(7)	-	5.2409(5)
*	Dy ₂ Zn _{17-x} Al _x (x=0.72)	Th ₂ Zn ₁₇	<i>R-3m</i>	8.9870(3)	-	13.1422(5)
*	DyZn _{2-x} Al _x (x = 0.88)	KHg ₂	<i>Imma</i>	4.4797(7)	7.096(1)	7.668(1)
*	DyZn _{1-x} Al _x (x = 0.35)	KCl	<i>Pm-3m</i>	3.5956(4)	-	-
*	DyAl _{3-x} Zn _x (x = 0.25)	TiNi ₃	<i>P6₃/mmc</i>	6.0963(3)	-	9.5502(5)
*	DyAl _{2-x} Zn _x (x = 0.24)	MgCu ₂	<i>Fd-3m</i>	7.8375(4)	-	-
1	DyZn _{6,3-4,6} Al _{1,7-3,4}	HoZn ₅ Al ₃	<i>I4/mmm</i>	8.6267(5)- 8.5866(5)	-	16.354(2)- 16.602(1)
2	Dy _{4,21} Zn _{32,2} Al _{2,0}	SmZn ₁₁	<i>P6₃/mmm</i>	8.9920(6)	-	8.7624(7)
3	Dy ₃ Zn _{6,4-3,1} Al _{4,6-7,9}	La ₃ Al ₁₁	<i>Immm</i>	4.2392(2)- 4.2213(3)	12.4428(7)- 12.451(1)	9.7751(6)- 10.0056(8)
4	~DyZn _{2,5} Al _{0,5}	...	...	...	...	...

*Limiting compositions of solid solutions based on binary compounds

At an isoconcentration of ~20.5 at.% Dy, a ternary compound with a La₃Al₁₁ structure is formed with a significant homogeneity region. A decrease in the *a* parameter and an increase in the *c* parameter, as well as a non-linear change in the *b* parameter, are observed with the statistical replacement of zinc atoms by aluminium atoms, while the cell volume naturally increases when smaller zinc atoms (*r*_{Zn} = 0.1332 nm) are replaced by aluminium atoms (*r*_{Zn} = 0.1431 nm), the *b/a* and *c/b* ratios remain constant and the *c/a* value increases (Fig. 1).

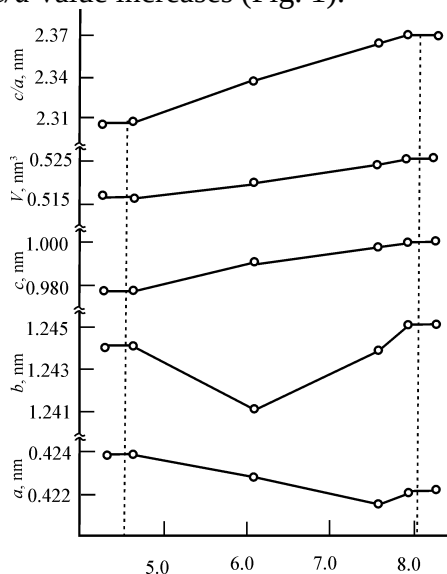


Fig. 2. Variation of parameters, cell volume and *c/a* ratio within the homogeneity region of the Dy₃Zn_{11-x}Al_x phase.

The distribution of smaller atoms (Zn/Al) within the homogeneity region of the ternary compound Dy₃Zn_{11-x}Al_x, which statistically fill the crystallographic positions in the structure of the compound, has been studied. As the aluminium content increases within the homogeneity region of the Dy₃Zn_{11-x}Al_x phase, the ratio of the statistical Al/Zn mixture increases in all crystallographic positions except the X4 (8l) position where the atoms are in a coordination polyhedron in the form of an antiprism (CN 10).

This work was partly supported by the Simons Foundation (Award Number – 1290588).

1. Akselrud L., Grin Yu. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) // J. Appl. Crystallogr. 2014. Vol. 47. P. 803–805. DOI: 10.1107/S1600576714001058

УДК 546.48'24:544.022.384.2

АНТИСТРУКТУРНІ ДЕФЕКТИ У КРИСТАЛАХ PbTe ТА CdTe

Л. Бабінчук, В. Говдяк, І. Горічок

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ,
Україна, Ihor.Horichok@pnu.edu.ua

Напівпровідникові матеріали групи A^4B^6 використовуються для створення на їх основі термоелектричних перетворювачів, а саме пристроїв перетворення теплової енергії в електричну. Одним з основних способів підвищення ККД є легування матеріалів донорними чи акцепторними домішками. Причому рівень легування є високим. Оптимальними термоелектричними властивостями володіють матеріали в області домішкової провідності. За таких умов надзвичайно важливим для прогнозування впливу домішок на властивості є аналіз дефектної підсистеми матеріалів.

Так зокрема, високих термоелектричних характеристик було досягнуто для твердих розчинів GePb(Bi)Te та PbCdTe . Для обох вказаних матеріалів кількість додаткового компоненту, що вводився у кристал, не відповідав такій же кількості створюваних електроактивних дефектів, або ж їх дія компенсувалась власними дефектами. Попередній аналіз експериментальних даних в рамках теорії точкових дефектів, свідчить про недостатність врахування лише вакансій та міжвузлових атомів у моделях дефектних підсистем.

В даній роботі проаналізовано можливість утворення антиструктурних дефектів у кристалах PbTe та CdTe . Зокрема, проведено розрахунок енергій утворення вакансій та антиструктурних дефектів, а також розрахунок їх концентрацій з метою встановлення ролі останніх у формуванні дефектної підсистеми кристалів. Для розрахунку енергій утворення дефектів використовували напівемпіричний метод з використанням термодинамічних параметрів кристалів та квантово-хімічний розрахунок з використанням програми GAMES. Для розрахунку концентрацій дефектів використано метод мінімізації термодинамічного потенціалу Гіббса як функції концентрації дефектів.

На основі отриманих результатів розрахунку енергій утворення дефектів можна зробити висновок, що енергії антиструктурних дефектів є співмірними з енергіями утворення вакансій як для кристалів PbTe , так і CdTe . Причому такий результат отримано і з використанням напівемпіричного методу і квантово-хімічного моделювання. Таким чином, можна було б очікувати, що концентрації вакансій та антиструктурних дефектів можуть бути співмірними.

Проте, на основі проведених розрахунків концентрацій дефектів, вільних носіїв заряду, температурної залежності ширини області гомогенності та співставлення отриманих результатів з експериментальними, можна зробити висновки, що у лише кристалах кадмій телуриду роль антиструктурних дефектів у формуванні властивостей є значною. З боку надстехіометричного телуру антиструктурні дефекти Te_{Cd} є відповідальними за експериментально спостережувану ширину області гомогенності. З боку надстехіометричного кадмію однаково задовільно (з точки зору інтерпретації експериментальних даних) можуть реалізовуватись модель домінування вакансії телуру, або антиструктурних атомів кадмію. Проте, у випадку реалізації моделі домінування Cd_{Te} розрахована лінія солідусу з боку надлишку металу характеризується більшою кривизною, як це і має місце на експерименті. Крім того, положення максимальної температури плавлення на T - x діаграми відтворюється без введення у модель міжвузлових атомів телуру.

На відміну від кристалів CdTe , у кристалах PbTe модель, що враховує можливість утворення антиструктурних дефектів виявилась непридатною для опису експериментальних даних при жодних розумних значеннях параметрів, що можуть варіюватися, зокрема і енергії їх утворення. Розраховані концентрації точкових дефектів у залежності від температури відпаду кристалів T та парціального тиску пари телуру P_{Te} найбільш задовільно узгоджуються з експериментальними даними у випадку використання моделі домінування вакансій у обох (катионній та аніонній) підгратках.

UDC: 621

STRUCTURAL, ELECTRONIC AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF Ag_3AsS_3 CRYSTAL: FIRST PRINCIPLE CALCULATION

T. Babuka¹, A.V. Gomonnai², O.O. Gomonnai³, I. Babuka¹

¹*Institute of Physics and Chemistry of Solid State, Uzhhorod National University, Voloshin Str., 54,
88000 Uzhhorod, Ukraine, E-mail: tanya.babuka@gmail.com*

²*Institute of Electron Physics, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine, Universytets'ka Str., 21, Uzhhorod
88017, Ukraine, gomonnai@ukr.net*

³*Uzhhorod National University, Narodna Square, 3, 88000 Uzhhorod, Ukraine,
E-mail: gomonnai.o@gmail.com*

Second-order nonlinear optical materials are of great interest for the development of new coherent and controlled laser devices whose role becomes even more significant in many research areas including medicine and materials science [1-2]. One of such materials is proustite Ag_3AsS_3 which is characterized by good piezoelectric and pyroelectric properties, being as well a photosensitive semiconductor and an acentrosymmetric crystal with a high nonlinear optical coefficient ($d_{31} = 10.4 \text{ pm/V}$) [3-4]. Ag_3AsS_3 can be used as a uniaxial crystal for optical mode mixing and second harmonic generation.

We performed quantum-chemical calculations using modern approaches of density functional theory to describe structural, electronic and vibrational characteristics of Ag_3AsS_3 crystal. For computer modeling of such kind one of the most important issues is the choice of method which after full optimization of the structure (lattice parameters, atom positions, symmetries) would result in the unit cell parameters providing the best agreement with experimental data. We found that for the Ag_3AsS_3 crystal a combination of the DFT/GGA approach with the dispersion correction factor (D) [5] gives the most appropriate results compared to the experimental data, in this case the deviation from the determined lattice parameters does not exceed 3%.

Thus, using the DFT/GGA-D approach after optimization of the Ag_3AsS_3 crystal structure we performed calculations of the energy band structure and partial densities of states. First calculations of vibrational characteristics of the Ag_3AsS_3 crystals using *ab initio* methods were carried out, the phonon dispersion spectrum and partial densities of phonon states were obtained. The calculated phonon frequencies are compared to the experimental data. A good agreement of the theoretical and experimental data was obtained.

Acknowledgement. The work was supported by the "Advanced Science in Ukraine" grant No. 2023.03/0013 by National Research Foundation of Ukraine.

1. Lin, H., Wei, W.B., Chen, H., Wu, X.T., Zhu, Q.L.: Rational design of infrared nonlinear optical chalcogenides by chemical substitution. *Coord. Chem. Rev.* 406, 213150 (2020). <https://doi.org/10.1016/J.CCR.2019.213150>.

2. Guo, S.P., Chi, Y., Guo, G.C.: Recent achievements on middle and far-infrared second-order nonlinear optical materials. *Coord. Chem. Rev.* 335, 44–57 (2017). <https://doi.org/10.1016/J.CCR.2016.12.013>.

3. Zhao, R.Q., Zhou, J., Liu, X., Li, R., Tang, Q.L.: A new solvothermal route to crystalline proustite Ag_3AsS_3 with photocatalytic properties. *Inorg. Chem. Commun.* 46, 17–20 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2014.04.031>.

4. Bordovsky, V.A., Gunia, N.Yu., Castro, R.A.: High-frequency dielectric study of proustite crystals Ag_3AsS_3 . *Journal of Physics: Conference Series.* 572, 012019 (2014). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/572/1/012019>.

5. Grimme S.J.: Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Comput. Chem.* 27, 1787 (2006). <https://doi.org/10.1002/jcc.20495>.

PACS – 61.80.Jh, 77.80.-e

EFFECT OF RADIATION DEFECTS ON ELECTROPHYSICAL PARAMETERS OF LAYERED CuInP_2S_6 FERRIELECTRICS

H. Ban¹, D. Gal², A. Haysak¹, I. Haysak¹, A. Molnar¹

¹*Uzhhorod National University, Voloshina Str. 54, Uzhhorod, 88000, Ukraine*

²*WIGNER Research Center for Physics, Po.Box. 49, 1525 Budapest, Hungary*

alexander.molnar@uzhnu.edu.ua

Recently, there has been an increased interest in layered crystals with the possibility of application as active elements of functional electronic devices. Materials with multiferroic properties stand out among them. One of the promising representatives of this family of Van der Waals crystals is the room-temperature ferrielectric CuInP_2S_6 . Almost all types of modern electronic devices have already been created on its basis - diodes, transistors, memristors, memory cells, etc. The main advantage of this material is that its ferrielectric properties are preserved at thicknesses less than 4 nm, and spontaneous polarization in them is directed perpendicular to the structural layers.

Like all electronic materials, CuInP_2S_6 crystals have certain disadvantages, among which should be noted the relatively low phase transition temperature ($T_c \approx 315$ K), ionic conductivity, and others. Therefore, researchers all over the world are looking for a possibility to improve their parameters. We investigated the influence of radiation defects on the electrophysical parameters of CuInP_2S_6 crystals, which is especially important for the further use of devices based on them in the aerospace industry. In addition, this technique (irradiation of samples) has long been used in the semiconductor industry, for example, to modify the mobility of charge carriers.

For our studies we used crystals of CuInP_2S_6 obtained by the Bridgman method from the melt, the chemical composition of which was confirmed by the EDACS method. The samples had dimensions $5 \times 5 \times 3$ mm³. After measuring the temperature dependence of their dielectric constant (reference behavior), this sample was split into 3 plates, with a thickness of 1 mm. This was done to be sure of the same chemical composition of the samples. They were then irradiated with β and γ particles at the "Microtron" acceleration machine (10^{15} cm²). After irradiation of the crystals, the temperature dependence of dielectric permittivity was immediately measured again in the same conditions as in the initial "reference" studies.

We have found that irradiation of CuInP_2S_6 samples with β and γ particles significantly affects the dielectric constant both at the phase transition and at room temperature. Moreover, the phase transition temperature and the shape of the anomaly $\epsilon(T)$ do not change significantly. An increase in the irradiation dose enhances the suppression of the dielectric constant, and the replacement of β with γ particles further reduces ϵ . This phenomenon is most likely due to an increase in the defectiveness of the crystal structure, and the difference in the efficiency of β and γ particles is caused by the different penetration depths of these particles. The formed radiation defects are most likely charged, which capture charge carriers in the CuInP_2S_6 crystal, which is manifested in the reduced electrical conductivity of the samples. This behavior can be observed in the form of a decrease in the high-temperature "tails" $\epsilon^*(T)$ above 330 K, which are caused by the conductivity of the samples.

Based on the results obtained, we can conclude that radiation significantly affects the electrophysical properties of layered CuInP_2S_6 ferrielectric crystals, which should be taken into account in their practical application in aerospace devices.

UDC 621.785

INFLUENCE OF BORADIATION PARAMETERS ON THE GROWTH KINETICS OF BORIDATION LAYERS ON MEDIUM-CARBON STEEL

O. Ye. Barmin, S. V. Hryhorieva

*National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute",
St. Kirpychova, 2, 61002, Kharkiv, Ukraine
e-mail: axel.com.ua@gmail.com*

Boronizing is a thermochemical surface treatment that involves the diffusion of boron atoms into the surface of a metal workpiece, forming hard boride layers with the base material. This process significantly improves wear resistance, surface hardness, and corrosion resistance, making it highly useful in tribological applications where controlling friction and wear is critical. The boronizing process typically occurs at temperatures ranging from 700°C to 1000°C and can be performed in solid, liquid, or gaseous mediums. The most common method, pack boriding, operates similarly to pack carburizing and is widely used due to its simplicity and cost-effectiveness. The surface hardness of borided steels generally falls between 1650 and 2000 HV, making the treated materials well-suited for applications requiring high hardness [1].

Boronizing can be applied to most ferrous materials, including cast steels, structural steels, Armco iron, gray and ductile iron, and sintered iron and steel. It is also applicable to certain nonferrous materials, such as titanium, cobalt, nickel, and molybdenum-based alloys, as well as cemented carbides [2].

In addition to improving hardness and wear resistance, boronizing enhances corrosion resistance in various environments. For example, boronized austenitic stainless steel exhibits excellent resistance to hydrochloric acid, making it ideal for applications in aggressive chemical environments. However, one limitation of the boride layers is their brittleness, which makes them unsuitable for applications involving dynamic or impact loads [3].

This study specifically examines the diffusion kinetics, including the growth rate and the influence of process parameters (such as temperature and time), on the formation of boride layers on medium-carbon steel (AISI 1045) after powder-pack boriding at different conditions. Factors such as temperature and duration of boronizing significantly affect the depth and characteristics of the boride layers. It was established that increasing the boronizing temperature from 850°C to 950°C more than doubles the thickness of the boride layer, indicating that temperature is a critical parameter in controlling the diffusion process [4].

A mathematical model was developed based on experimental data, which accurately describes the relationship between boronizing parameters (temperature and duration) and the thickness of the boride layer. The model's predictions showed an error margin of less than 10% when compared to experimental results. Furthermore, it was found that the microhardness distributions across the boride layer remain consistent regardless of temperature and time variations, suggesting that, in the case of medium-carbon steels, these factors do not significantly influence the microhardness values.

1. Singh, G., & Kumar, D. Advances in Surface Engineering: Boronizing Processes for Enhanced Wear Resistance. *Journal of Materials Processing Technology*, 295, 117-124.

2. Wang, L., & Dong, H. (2019). Innovations in Boronizing: Optimizing Parameters for Maximized Efficiency and Durability. *Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 102(7), 3541-3552.

3. Kola, A., & Soriano, C. (2021). Boronizing Techniques: Microstructural and Mechanical Effects on Different Steel Grades. *Journal of Materials Science*, 56(14), 9037-9050.

4. Hryhorieva S. V. Vplyv parametriv boruvannia na kinetyku rostu borydnykh shariv na vuhletsevi stali / S. V. Hryhorieva, O. Ye. Barmin // *Informatsiini tekhnolohii: nauka, tekhnika, tekhnolohiia, osvita, zdorovia: tezy dopovidei KhXKhII mizhnarodnoi naukovo-praktychnoi konferentsii MicroCAD-2024 / za red. prof. Sokola Ye.I. – Kharkiv: NTU «KhPI». – 1665 s.*

УДК 621.785

КІНЕТИКА РОСТУ БОРИДНИХ ШАРІВ НА ВИСОКОВУГЛЕЦЕВІЙ СТАЛІ

О.Є. Бармін, С.В. Григор'єва

*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»,
вул. Кирпичова, 2, 61002 м. Харків, Україна
e-mail: axel.com.ua@gmail.com*

Розробка функціональних поверхневих шарів з унікальними механічними, технологічними і спеціальними характеристиками є однією з найважливіших задач сучасного матеріалознавства. Для досягнення цих цілей необхідно вдосконалювати існуючі технології та розробляти нові методи обробки металів, спрямовані на підвищення їх експлуатаційних властивостей, таких як зносо- і жаростійкість [1, 2].

Одним з найперспективніших методів для створення таких поверхневих шарів є хіміко-термічна обробка (ХТО), яка широко застосовується для нанесення захисних покриттів. Серед різних видів ХТО особливою популярністю користується борування, яке дозволяє наситити поверхню сталі бором, утворюючи шари з високою термостійкістю та зносостійкістю [3].

Мета дослідження полягала у вивченні впливу параметрів процесу борування на кінетику росту боридних шарів на високовуглецевій сталі. Для досягнення мети був проведений комплекс металографічних та механічних досліджень на зразках сталі після різних комбінацій параметрів борування.

Методика експерименту включала процес дифузійного борування зразків зі сталі марки У8, який проводився в камерній печі при температурах насичення 850, 900 та 950°C у середовищі борвмісних компонентів з витримкою 4, 6 та 8 годин [4].

Оптичні дослідження показали, що мікроструктура сталі У8 складається з трьох зон: зовнішнього боридного шару, зони дифузії та основного матеріалу. Боридний шар має характерну пилкоподібну морфологію, ступінь зубчастості якої варіюється в залежності від параметрів процесу.

На основі проведених досліджень було виявлено, що збільшення температури та тривалості борування сприяє значному зростанню товщини боридного шару. Було встановлено, що температура є ключовим фактором, впливаючи на глибину проникнення бору в більшій мірі, ніж час витримки, що може призводити до збільшення товщини шару більш ніж у два рази.

Аналіз розподілу мікротвердості через товщину боридного шару показав, що незалежно від параметрів процесу, характер цього розподілу залишається однаковим. Це свідчить про те, що температура і тривалість борування не мають значного впливу на показники мікротвердості боридної зони у випадку високовуглецевої сталі.

1. Singh, G., & Kumar, D. Advances in Surface Engineering: Boronizing Processes for Enhanced Wear Resistance. Journal of Materials Processing Technology, 295, 117-124.

2. Motallebzadeh, A., & Khorasani, A. M. Effect of Boronizing on High Carbon Steels: A Review of Microstructure and Wear Resistance. Surface and Coatings Technology, 402, 126-135.

3. Chen, X., Zhang, Y., & Zhang, Z. Diffusion Kinetics of Boron in Steels: A Comparative Study on Boriding Parameters. Materials Science and Engineering A, 833, 142-152.

4. Григор'єва С. В. Вплив параметрів борування на кінетику росту боридних шарів на вуглецевій сталі / С. В. Григор'єва, О. Є. Бармін // Інформаційні технології: наука, техніка, технологія, освіта, здоров'я: тези доповідей XXXII міжнародної науково-практичної конференції MicroCAD-2024, 22-25 травня 2024 р. / за ред. проф. Сокола Є.І. – Харків: НТУ «ХПІ». – 1665 с.

УДК 546.289+543.632.471+549.31

ВЗАЄМОДІЯ ГЕРМАНІЙ(СТАНУМ)(IV) ТА ФОСФОР(V) СУЛЬФІДІВ З ВИСОКИМ ВМІСТОМ АРГЕНТУМ(I) СУЛЬФІДУ ПРИ 500 К

Березнюк О.П., Зінич І.Б., Неведейк В.С., Алрікік М., Піскач Л.В.

Волинський національний університет імені Лесі Українки,
пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк, Україна
piskach.lyudmyla@vnu.edu.ua

Дослідження квазіпотрійних систем на основі бінарних сполук, які мають практичне застосування, проводилося з метою пошуку нових напівпровідникових матеріалів. Взаємодію компонентів при 500 К у системах $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Ge}(\text{Sn})\text{S}_2-\text{P}_2\text{S}_5$ досліджено в області 0-100 мол. % аргентум (I) сульфід у обмежувачих $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Ge}(\text{Sn})\text{S}_2$ і 66-100 мол. % аргентум (I) сульфід у вздовж сторони $\text{Ag}_2\text{S}-\text{P}_2\text{S}_5$.

В системах $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Ge}(\text{Sn})\text{S}_2$ існує по три тернарні сполуки; дві з яких є аналогічного складу при співвідношенні компонентів $\text{Ag}_2\text{S}:\text{Ge}(\text{Sn})\text{S}_2$ 4:1 та 1:1 відповідно. В германієвмісній системі це сполуки: Ag_8GeS_6 (аналог мінералу аргіродиту), $\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$ і Ag_2GeS_3 , а в станумовмісній: Ag_8SnS_6 (аналог мінералу конфільдиту), Ag_2GeS_3 та $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$ [1, 2]. Діаграма стану системи $\text{Ag}_2\text{S}-\text{P}_2\text{S}_5$ згідно даних [3] характеризується утворенням п'яти тернарних фаз: Ag_7PS_6 , Ag_3PS_4 , $\text{Ag}_7\text{P}_3\text{S}_{11}$, $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$, AgPS_3 .

За умов експерименту в системі $\text{Ag}_2\text{S}-\text{GeS}_2-\text{P}_2\text{S}_5$ підтверджено існування тернарних сполук Ag_8GeS_6 , $\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$, Ag_2GeS_3 , Ag_7PS_6 , Ag_3PS_4 , $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$, AgPS_3 . Фаза складу « Ag_4GeS_4 », що наведена в літературних даних [1], при температурі відпалу має аналогічний дифракційний набір відбить до $\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$. При 500 К в межах досліджуваної підсистеми $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7-\text{GeS}_2$ (рис. 1 а) між 8 однофазними полями ($\alpha-\text{Ag}_2\text{S}$, $\beta-\text{GeS}_2$, $\delta-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$, $\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$, Ag_2GeS_3 , $\gamma-\text{Ag}_7\text{PS}_6$, $\zeta-\text{Ag}_3\text{PS}_4$, $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$) лежать 13 областей двофазних рівноваг: $\alpha-\delta$, $\delta-\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$, $\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}-\text{Ag}_2\text{GeS}_3$, $\text{Ag}_2\text{GeS}_3-\beta$, $\alpha-\gamma$, $\gamma-\zeta$, $\zeta-\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$, $\gamma-\delta$, $\zeta-\delta$, $\zeta-\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$, $\zeta-\text{Ag}_2\text{GeS}_3$, $\zeta-\beta$, $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7-\beta$, які поділяють концентраційний трикутник на 6 трифазних полів: $\alpha-\gamma-\delta$, $\delta-\zeta-\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$, $\gamma-\delta-\zeta$, $\zeta-\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}-\text{Ag}_2\text{GeS}_3$, $\zeta-\text{Ag}_2\text{GeS}_3-\beta$ та $\zeta-\beta-\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$. При температурі 500 К, як видно із перерізу, дуже велика розчинність на основі $\text{BTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$ (до 90 мол. % Ag_7PS_6). Тому є значними двофазні області $\alpha-\text{Ag}_2\text{S}-\text{BTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$ та $\text{BTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6-\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$, а синтезовані зразки за температури 500 К є в своїй більшості двофазними як в частині $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Ag}_7\text{PS}_6-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$ ($\alpha-\text{Ag}_2\text{S} + \text{BTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$), так і між Ag_3PS_4 , Ag_7PS_6 і $\text{Ag}_{10}\text{Ge}_3\text{S}_{11}$ ($\text{Ag}_3\text{PS}_4 + \text{BTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$). Однак $\text{BTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$ (ПГ F-43m) швидко, незалежно від умов відпалу та гарту, переходить у $\text{HTM}-\text{Ag}_8\text{GeS}_6$ (ПГ P2.3).

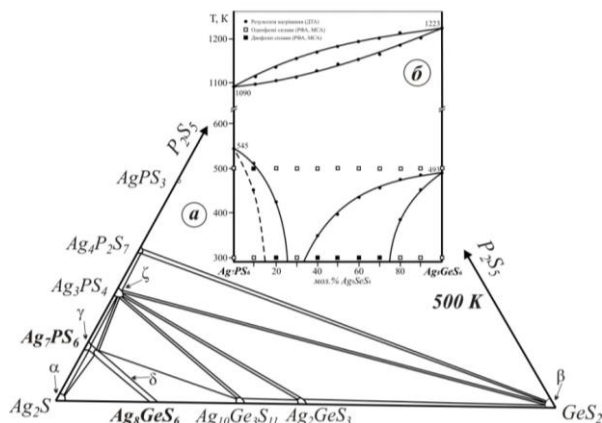


Рис. 1. Ізотермічний переріз підсистеми $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7-\text{GeS}_2$ при 500 К (а); діаграма стану системи $\text{Ag}_8\text{GeS}_6-\text{Ag}_7\text{PS}_6$ [4] (б)

Квазібінарний переріз $\text{Ag}_8\text{GeS}_6\text{--Ag}_7\text{PS}_6$ [4] (рис. 1 б) квазіпотрійної системи $\text{Ag}_2\text{S--GeS}_2\text{--P}_2\text{S}_5$; характеризується повною взаємною розчинністю компонентів (I тип за Розебомом) між ВТ-модифікаціями цих сполук ($\text{Ag}_{8-x}\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x\text{S}_6$). При 500 К двофазною є лише область в невеликому концентраційному інтервалі від 90 мол. % до ~95 мол. % Ag_7PS_6 між твердими розчинами ВТМ $\text{Ag}_{8-x}\text{Ge}_{1-x}\text{P}_x\text{S}_6$ (ПГ $F\text{-}43m$) та НТМ Ag_7PS_6 (ПГ $P2_13$).

В системі $\text{Ag}_2\text{S--SnS}_2\text{--P}_2\text{S}_5$ за температури 500 К підтверджено існування тернарних сполук Ag_8SnS_6 , Ag_2SnS_3 , $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$, Ag_7PS_6 , Ag_3PS_4 , $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$, AgPS_3 (рис. 2 а). Порошкограма фази « $\text{Ag}_2\text{Sn}_2\text{S}_5$ », про яку повідомляють в літературі, має аналогічні до $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$ відбиття. В частині підсистеми $\text{Ag}_2\text{S--Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7\text{--SnS}_2$ (рис. 2 а) при температурі 500 К встановлено існування також 8 однофазних полів: $\alpha\text{-Ag}_2\text{S}$, $\beta\text{-SnS}_2$, $\gamma\text{-Ag}_7\text{PS}_6$, $\zeta\text{-Ag}_3\text{PS}_4$, $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$, $\delta\text{-Ag}_8\text{SnS}_6$, Ag_2SnS_3 , $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$. Двофазні рівноваги: $\alpha\text{-}\delta$, $\delta\text{-Ag}_2\text{SnS}_3$, $\text{Ag}_2\text{SnS}_3\text{-Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$, $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8\text{-}\beta$, $\alpha\text{-}\gamma$, $\gamma\text{-}\zeta$, $\zeta\text{-Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$, $\gamma\text{-}\delta$, $\zeta\text{-}\delta$, $\zeta\text{-Ag}_2\text{SnS}_3$, $\zeta\text{-Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$, $\zeta\text{-}\beta$, $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7\text{-}\beta$ розділяють площину концентраційного трикутника на 6 трифазних полів: $\alpha\text{-}\delta\text{-}\gamma$, $\delta\text{-Ag}_2\text{SnS}_3\text{-}\zeta$, $\delta\text{-}\gamma\text{-}\zeta$, $\text{Ag}_2\text{SnS}_3\text{-}\zeta\text{-Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$, $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8\text{-}\beta\text{-}\zeta$, $\beta\text{-}\zeta\text{-Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7$. Області гомогенності на основі вихідних бінарних та тернарних сполук є незначними, за винятком Ag_8SnS_6 та Ag_7PS_6 .

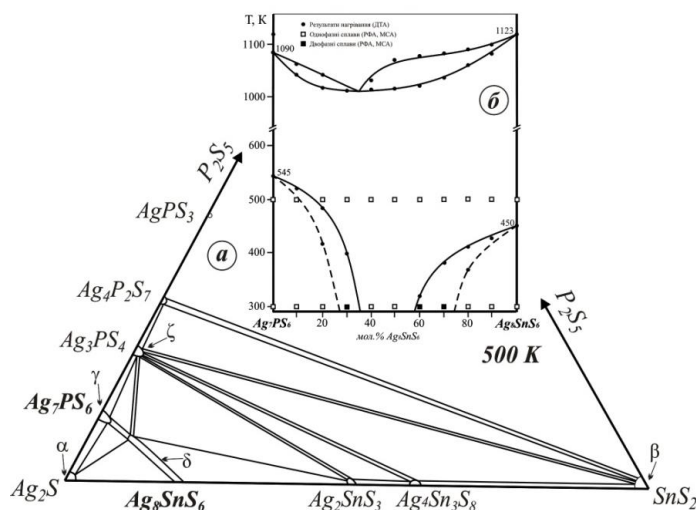


Рис. 2. Ізотермічний переріз підсистеми $\text{Ag}_2\text{S--Ag}_4\text{P}_2\text{S}_7\text{--SnS}_2$ при 500 К (а);
діаграма стану системи $\text{Ag}_8\text{SnS}_6\text{--Ag}_7\text{PS}_6$ [4] (б)

Система $\text{Ag}_8\text{SnS}_6\text{--Ag}_7\text{PS}_6$ [4] по характеру взаємодії подібна до аналогічної германієвмісної (рис. 2 б) та характеризується утворенням неперервного ряду твердих розчинів ($\text{Ag}_{8-x}\text{Sn}_{1-x}\text{P}_x\text{S}_6$) між ВТ-модифікаціями вихідних сполук (ПГ $F\text{-}43m$). Криві ліквідусу та солідусу мають мінімум при ~65 мол. % Ag_7PS_6 (III тип за Розебомом). В підсолідусній області нижче температур фазових перетворень обох вихідних сульфідів між однофазними областями знаходяться двофазні області в межах ~25-42 мол. % та ~65-73 мол. % Ag_7PS_6 .

1. Кохан О. П. Взаємодія в системах $\text{Ag}_2\text{X--B}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{B}^{\text{IV}}\text{--Si, Ge, Sn; X--S, Se}$) і властивості сполук : дис. канд. хім. наук : 02.00.01. Ужгород, 1996. 21 с.

2. Nagel A., Range K.-J. Verbindungsbildung im System $\text{Ag}_2\text{S--GeS}_2\text{--AgI}$. *Z. Naturforsch.* 1978. 33 b. P. 1461-1464. DOI: [10.1515/znb-1978-1218](https://doi.org/10.1515/znb-1978-1218)

3. Andrae H., Blachnik R. Metal sulphide-tetraphosphorusdekasulphide phase diagrams. *J. Alloys Compd.* 1992. 189. P. 209-215.

4. Березнюк О.П., Смітюх О.В., Піскач Л.В. Взаємодія по перерізах $\text{Cu}(\text{Ag})_7\text{PS}_6\text{--Cu}(\text{Ag})_8\text{Ge}(\text{Sn})\text{S}_6$. *Проблеми хімії та сталого розвитку.* 2022. 4. С. 3-16. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2022-4-1>

УДК 546.19+546.56+549.31

ФІЗИКО-ХІМІЧНА ВЗАЄМОДІЯ МІЖ АРСЕН(ІІІ), СТАНУМ(ІV) ТА КУПРУМ(АРГЕНТУМ(І)) СУЛЬФІДАМИ

О.П. Березнюк, П.М. Деркач, Л.Д. Гулай, Л.В. Піскач

Волинський національний університет імені Лесі Українки,
Україна, 43025, м. Луцьк, просп. Волі, 13
piskach.lyudmyla@vnu.edu.ua

Купрум(аргентум) (І) тіоарсеніти та тіостанати належать до важливих функціональних матеріалів сучасної техніки. Більшість сполук цього класу широко використовуються або вважаються перспективними матеріалами з цінними напівпровідниковими, фото-, сегнето- та термоелектричними властивостями [1–6].

Методами рентгенівського фазового (дифрактометр ДРОН 4-13, $\text{Cu K}\alpha$ -випромінювання) та мікроструктурного (мікротвердометр Leica VMHT Auto) аналізів досліджено взаємодію компонентів у квазіпотрійних системах $\text{Cu}(\text{Ag})_2\text{S}-\text{As}_2\text{S}_3-\text{SnS}_2$ у повному концентраційному інтервалі при 500 К.

Ізотермічний переріз системи $\text{Cu}_2\text{S}-\text{As}_2\text{S}_3-\text{SnS}_2$ за температури 500 К представлено на рис. 1 а. Встановлено існування нової тетрарної сполуки $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{Sn}_{11}$ (50 мол. % Cu_2S /33,3 мол. % As_2S_3 /16,7 мол. % SnS_2), дифрактограму зразка якої наведено на рис. 1 б, а результат дослідження морфології поверхні методом скануючої електронної мікроскопії – на рис. 1 в. Сполука $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{Sn}_{11}$ за температури відпалу перебуває у рівновагах із тернарними $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5$, $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$, Cu_2SnS_3 та бінарною As_2S_3 сполуками. Зразки, які потрапляють на переріз $\text{As}_2\text{S}_3 - \text{Cu}_2\text{SnS}_3$, мають відбиття лише тернарної сполуки Cu_2SnS_3

(при наведених умов синтезу As_2S_3 перебуває в аморфному стані). З цього слідує, що рівновага буде між As_2S_3 та Cu_2SnS_3 , а не між сполуками $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$ та SnS_2 .

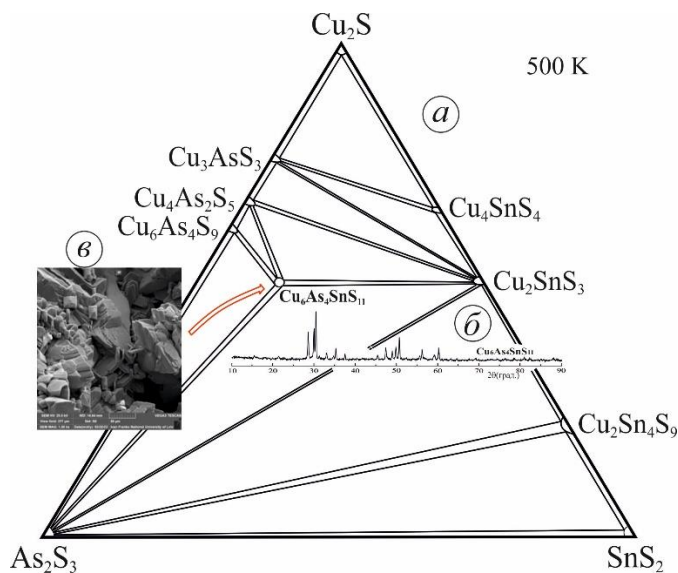


Рис. 1. Ізотермічний переріз системи $\text{Cu}_2\text{S} - \text{As}_2\text{S}_3 - \text{SnS}_2$ при 500 К (а);

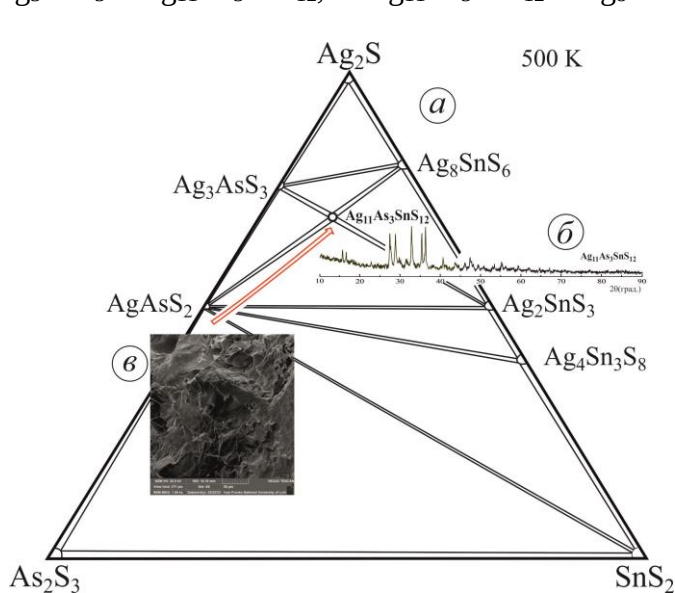
дифрактограма зразка $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{Sn}_{11}$ (б);

СЕМ-зображення зразка тетрарної фази $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{Sn}_{11}$ при збільшенні 1.00 kx (в).

За наведених умов в квазіпотрійній системі існують десять однофазних: Cu_2S , As_2S_3 , SnS_2 , Cu_3AsS_3 , $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5$, $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$, Cu_4SnS_4 , Cu_2SnS_3 , $\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9$, $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{Sn}_{11}$; вісімнадцять двофазних: $\text{Cu}_2\text{S} - \text{Cu}_3\text{AsS}_3$, $\text{Cu}_3\text{AsS}_3 - \text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5$, $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5 - \text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$, $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9 - \text{As}_2\text{S}_3$, $\text{Cu}_2\text{S} - \text{Cu}_4\text{SnS}_4$, $\text{Cu}_4\text{SnS}_4 - \text{Cu}_2\text{SnS}_3$, $\text{Cu}_2\text{SnS}_3 - \text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9$, $\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9 - \text{SnS}_2$, $\text{SnS}_2 - \text{As}_2\text{S}_3$, $\text{Cu}_3\text{AsS}_3 - \text{Cu}_4\text{SnS}_4$, $\text{Cu}_3\text{AsS}_3 - \text{Cu}_2\text{SnS}_3$, $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5 - \text{Cu}_2\text{SnS}_3$, $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5 - \text{Cu}_6\text{As}_4\text{Sn}_{11}$,

$\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$ – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$, $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$ – Cu_2SnS_3 , $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$ – As_2S_3 , As_2S_3 – Cu_2SnS_3 , As_2S_3 – $\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9$; дев'ять трифазних полів: Cu_2S – Cu_3AsS_3 – Cu_4SnS_4 , Cu_3AsS_3 – Cu_4SnS_4 – Cu_2SnS_3 , $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5$ – Cu_3AsS_3 – Cu_2SnS_3 , $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5$ – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$ – Cu_2SnS_3 , $\text{Cu}_4\text{As}_2\text{S}_5$ – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$ – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$, As_2S_3 – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{S}_9$ – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$, As_2S_3 – $\text{Cu}_6\text{As}_4\text{SnS}_{11}$ – Cu_2SnS_3 , As_2S_3 – Cu_2SnS_3 – $\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9$, As_2S_3 – $\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9$ – SnS_2 . Розчинність на основі усіх бінарних та тернарних сполук є незначною, за винятком $\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9$ по перерізу Cu_2S – SnS_2 .

Ізотермічний переріз системи Ag_2S – As_2S_3 – SnS_2 при 500 К представлено на рис. 2 а. При дослідженні фазових рівноваг на перетині двох перерізів AgAsS_2 – Ag_8SnS_6 та Ag_3AsS_3 – Ag_2SnS_3 вперше встановлено існування нової тетрарної сполуки складу $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$, дифрактограму зразка якої наведено на рис. 2 б, морфологію поверхні – на рис. 2 в. За температури відпалу в квазіпотрійній системі присутні дев'ять однофазних: Ag_2S , As_2S_3 , SnS_2 , Ag_3AsS_3 , AgAsS_2 , Ag_8SnS_6 , Ag_2SnS_3 , $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$; шістнадцять двофазних: Ag_2S – Ag_3AsS_3 , Ag_3AsS_3 – AgAsS_2 , AgAsS_2 – SnS_2 , Ag_2S – Ag_8SnS_6 , Ag_8SnS_6 – Ag_2SnS_3 , Ag_2SnS_3 – $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$, $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$ – SnS_2 , As_2S_3 – SnS_2 , Ag_3AsS_3 – Ag_8SnS_6 , Ag_3AsS_3 – $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$, $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$ – Ag_8SnS_6 , AgAsS_2 – $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$, $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$ – Ag_2SnS_3 , AgAsS_2 – Ag_2SnS_3 , AgAsS_2 – $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$, AgAsS_2 – SnS_2 та вісім трифазних полів: Ag_2S – Ag_3AsS_3 – Ag_8SnS_6 , Ag_3AsS_3 – Ag_8SnS_6 – $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$, AgAsS_2 – Ag_3AsS_3 – $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$, $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$ – Ag_8SnS_6 –



Ag_2SnS_3 ,
 AgAsS_2 – $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$ – Ag_2SnS_3 ,
 AgAsS_2 – Ag_2SnS_3 – $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$,
 AgAsS_2 – $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$ – SnS_2 ,
 As_2S_3 – AgAsS_2 – SnS_2 . Розчинність на
 основі вихідних бінарних та тернарних
 сполук є незначною.

Рис. 2. Ізотермічний переріз системи
 Ag_2S – As_2S_3 – SnS_2 при 500 К (а);
 дифрактограма зразка $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$
 (б);
 СЕМ-зображення зразка тетрарної
 фази $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$ при збільшенні 1.00 кх
 (в).

В роботах [7–9] представлена взаємодія в аналогічних стибієвмісних квазіпотрійних системах; з Аргентумом утворюється такого ж складу сполука ($\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{SnS}_{12}$).

1. Aliyev M.I., Dzhabrayilov T.J., Arasli D.G., and Ragimov R.N. Heat Capacity and thermal diffusivity of Cu_8GeSe_6 , Cu_8SnS_6 , Cu_8GeS_6 . Inorg. Mater. 1989. 25(7). 1015-1017.
2. Hull S., Berastegui P., Grippa A. Ag^+ diffusion within the rock-salt structured superionic conductor $\text{Ag}_4\text{Sn}_3\text{S}_8$. J. of Physics: Condensed Matter. 2005. 7. 1067-1084. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/17/7/002>
3. Moroz M.V. T-x space and fluidity of physical properties of crystals of homogeneous phases of inorganic systems. System Ag-Sn-S. Visnyk Lviv Univ. Ser. Physic. 2007. 40. 35-41.
4. Kumar V., Tripathy S.K., Jha V. Second order nonlinear optical properties of $\text{A}^{\text{I}}\text{B}^{\text{III}}\text{C}_2^{\text{VI}}$ chalcopyrite semiconductors. Appl. Phys. Lett. 2012. 8. DOI: [10.1063/1.4765058](https://doi.org/10.1063/1.4765058)

5. Melnikova N.V., Saipulaeva L.A., Khokhlachev P.P. et al. Effect of pressures on the electrical properties of multicomponent copper and silver chalcogenides. *Phys. Solid State*. 2015. 57. 2025-2029. <https://doi.org/10.1134/S1063783415100200>
6. Chun-Lin Lu, Lin Zhang, Yun-Wang Zhang, Shen-Ye Liu, Yang Mei. Electronic, optical properties, surface energies and work functions of Ag_8SnS_6 : First-principles method. *Chinese Phys. B*. 2015. 24(1). 017501. DOI: 10.1088/1674-1056/24/1/017501
7. Березнюк О.П., Алрікік М., Когут Ю.М., Піскач Л.В. Фазові рівноваги в системах $\text{Cu}(\text{Ag})_2\text{S}-\text{Sb}_2\text{S}_3-\text{SnS}_2$. Проблеми хімії та сталого розвитку. 2022. 4. 17–30. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2022-4-2>
8. Berezniuk O., Smitiukh O., Piskach L. The $\text{Cu}_2\text{S}-\text{Sb}_2\text{S}_3-\text{SnS}_2$ System. *Proceedings of the Shevchenko Scientific Society Series Chemical sciences*. 2023. 73. 45-58. DOI: 10.37827/ntsh.chem.2023.73.045
9. Berezniuk O.P., Kogut Y.M., Gulay L.D., Piskach L.V. Phase Equilibria in the $\text{Ag}_2\text{S}-\text{Sb}_2\text{S}_3-\text{SnS}_2$ System and the Novel Quaternary Chalcogenide $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{SnS}_{12}$. *J. Phase Equilib. Diffus.* 2024. 45. 723–731. <https://doi.org/10.1007/s11669-024-01126-7>

УДК 661.882.27; 535.37; 538.958

ВПЛИВ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ НА СИМЕТРІЮ ТА ОПТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ІОНІВ Mn^{4+} В ОКСИДІ МАГНІЮ К. Козоріз¹, І. Ворона¹, Л. Борковська¹

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, проспект Науки, 45,
м. Київ, 03028, Україна, e-mail: l_borkovska@ukr.net*

В останні десятиліття значно посилився інтерес до розробки та дослідження кристалічних матеріалів, активованих іоном Mn^{4+} , що зумовлено перспективами створення на їх основі недорогих та екологічно безпечних червоних люмінофорів. Такі люмінофори є складовою частиною білих та червоних світлодіодів, які використовуються для освітлення житлових приміщень, вирощування рослин, в оптичних сенсорах, тощо.

Іон Mn^{4+} в октаедричному кристалічному полі демонструє відносно вузькі смуги фотолюмінесценції (ФЛ) в спектральному діапазоні 600-750 нм і дві широкі смуги поглинання (збудження ФЛ) в ультрафіолетовому та синьо-зеленому діапазонах. Проте, присутність поблизу іона Mn^{4+} іншого точкового дефекту може впливати на його ФЛ шляхом зміни сили та симетрії кристалічного поля. Такі точкові дефекти можуть утворюватися в процесі синтезу люмінофору або вводитися навмисно для підсилення інтенсивності ФЛ іону Mn^{4+} .

В роботі досліджено вплив іонів Li^+ на ФЛ іону Mn^{4+} в кераміці MgO , легованій 0,01% Mn та 3% Li . В легованому манганом MgO додаткове легування Li , який заміщає вузловий іон Mg^{2+} і діє як акцептор, Li^+_{Mg} , використовується для компенсації електричного заряду $\text{Mn}^{4+}_{\text{Mg}}$. При цьому іон Mn^{4+} , який не має Li^+_{Mg} в найближчому оточенні, лишається в кубічній симетрії, а у випадку, коли іони Mn^{4+} і Li^+ розташовані поруч уздовж напрямку $\langle 100 \rangle$, симетрія Mn^{4+} знижується до тетрагональної. У спектрах електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) досліджуваної кераміки (Рис.1 зліва) були ідентифіковані сигнали, зумовлені іонами Mn^{4+} у кубічній і тетрагональній симетрії ($\text{Mn}^{4+}_{\text{к}}$ і $\text{Mn}^{4+}_{\text{т}}$, відповідно). Моделювання спектру ЕПР дозволило визначити параметри відповідних центрів: $g_{\text{cub}}=1,994$, $|A|_{\text{cub}}=70,9 \times 10^4 \text{ см}^{-1}$; $g_{1\text{tet}}=g_{2\text{tet}}=1,994$, $g_{3\text{tet}}=1,993$, $|A|_{\text{tet}}=71 \times 10^4 \text{ см}^{-1}$, $|D|_{\text{tet}}=220 \times 10^4 \text{ см}^{-1}$.

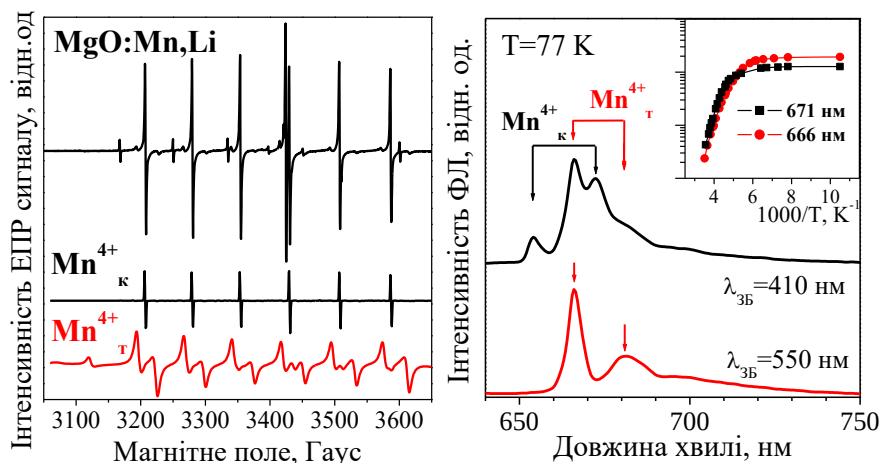


Рис.1. Зліва: спектр ЕПР кераміки MgO:Mn,Li та моделювання сигналів ЕПР $\text{Mn}^{4+}_{\text{к}}$ і $\text{Mn}^{4+}_{\text{т}}$ з параметрами, вказаними у тексті; Справа: спектри ФЛ кераміки при 77 К і збудженні лініями 410 і 550 нм та температурні залежності інтенсивності ліній ФЛ при 666 і 671 нм (вставка).

В спектрах низькотемпературної ФЛ виявлено лінії, зумовлені оптичними переходами в іонах Mn^{4+} в кубичній і тетрагональній симетрії (Рис.1справа), а саме: лінії при 654 нм і 671 нм приписані центру $\text{Mn}^{4+}_{\text{к}}$, а лінії при 666 нм і 681 нм - центру $\text{Mn}^{4+}_{\text{т}}$. Показано, що центр з тетрагональною симетрією демонструє меншу енергію ${}^2\text{E} \rightarrow {}^4\text{A}_2$ переходу в спектрі ФЛ та меншу енергію ${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_2$ переходу в спектрі збудження ФЛ, а також нижчу температуру $T_{1/2}$ термічного гасіння ФЛ, ніж центр з кубичною симетрією, що може бути використано для ідентифікації відповідних смуг ФЛ.

УДК 546.548.232.6:546.[657+64+663+681]'22

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{P6}_3\text{-Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ Н.М. Блашко, О.В. Марчук

Волинський національний університет імені Лесі Українки,
пр. Воли, 13, 43205, blashko.nazaraii@vnu.edu.ua

Багатокомпонентні халькогеніди на основі f -елементів систематично вивчаються на предмет дослідження кристалічної структури та фізичних властивостей. Перспективним напрямком розвитку матеріалознавства є введення у структуру халькогенідів атомів РЗМ. У роботі вперше представлено результати експериментального дослідження кристалічної структури складних халькогенідів $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ рентгенівським методом порошку.

Зразки стехіометричного складу $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$, масою 1 г кожен, синтезували сплавленням шихти, що була приготовлена із простих речовин із високим ступенем чистоти (99,99 %) у вакуумованих (10^{-2} Па) кварцевих контейнерах. Максимальна температура синтезу становила 1420 К, гомогенізуючий відпал тривав 500 годин за температури 770 К. Фазовий аналіз сульфідів $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ здійснювали за рентгенограмами, які були отримані на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах $2\Theta = 10 - 100^\circ$ ($\text{CuK}\alpha$ – випромінювання, крок сканування – 0.02° , експозиція у кожній точці – 20 с). Кристалохімічні розрахунки та оптимізацію геометрії здійснювали за допомогою пакету програм WinCSD [1] та Vesta [2].

Уточнення значень координат та теплових параметрів атомів синтезованих сульфідів в ізотропному наближенні (таблиця 1 та 2) призвело до відносно задовільних величин R -факторів [$R_I = 0.0804$ та $R_P = 0.2806$ (для $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$) та $R_I = 0.0800$ та $R_P = 0.2536$ (для $\text{Nd}_{1.5}\text{Tb}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$)].

Експериментальні, розраховані та різницеві між ними дифрактограми сульфідів $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ представлені на рисунку 1.

Елементарну комірку та координаційні поліедри [R 7S], [Ga1 6S] і [Ga2 4S] у структурі одержаних сульфідів зображено на рисунку 2.

У структурах $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ [ПГ $P6_3$, No 173; СТ $\text{La}_3\text{CuSiS}_7$; СП $hP23.3$; $a = 9.8866(7) \text{ \AA}$; $c = 6.0877(6) \text{ \AA}$ та $V = 515.3(1) \text{ \AA}^3$ (для $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$) та $a = 9.720(1) \text{ \AA}$; $c = 6.103(1) \text{ \AA}$ та $V = 499.3(2) \text{ \AA}^3$ (для $\text{Nd}_{1.5}\text{Tb}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$)] ПСТ $6c$ (x y z) повністю заповнена атомами статистичних сумішей Nd + Y(Tb). Атоми галію мають дві кристалографічні позиції: Ga1 [2a (0 0 z)] з коефіцієнтом заповнення атомного простору 66,7 %, та Ga2 [2b (1/3 2/3 z)] з повною атомною зайнятістю. Сульфур в кристалічній ґратці має три атомні позиції: S1, S2 (ПСТ $6c$) та S3 (ПСТ $2b$). На елементарну комірку припадає дві формульні одиниці $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}(\text{Tb})_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$

Атоми статистичних сумішей центрують тригональні призми з одним додатковим атомом [R 7S]. Атоми Ga1 (КЧ = 6) та Ga2 (КЧ = 4) мають окта- та тетраедричне оточення, відповідно.

Тригональні призми [R 7S] з'єднанні між собою ребрами і формують “блоки” (по три призми в кожному). Октаедри [Ga1 6S] мають спільні грані і утворюють “колони” в напрямку головної осі. Тригональні призми з октаедрами утворюють спільні ребра. Тетраедри [Ga2 4S] є ізольовані один від одного.

З огляду на те, що для синтезованих сульфідів характерною є нецетросиметрична (ПГ $P6_3$) структура, вони можуть бути використані як матеріали для дослідження нелінійно-оптичних характеристик. Також, за рахунок наявності в структурі f -елементів різної природи матеріали на основі таких халькогенідів можуть прогнозовано володіти слабкими парамагнітними властивостями.

Табл. 1. Координати та ізотропні параметри теплового коливання атомів
у структурі сульфиду $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$

Атоми	ПСТ	x/a	y/b	z/c	КЗП	$B_{\text{ізо}} \times 10^2 (\text{ \AA}^2)$
R1	6c	0.1513(2)	0.3749(2)	0.0608(10)	0.5Nd + 0.5Y	1.08(3)
Ga1	2a	0	0	0.249(2)	0.667	1.0(4)
Ga2	2b	1/3	2/3	0.6139(13)	1.0	1.0(3)
S1	6c	0.0894(9)	0.2240(8)	0.4875(12)	1.0	0.5(2)
S2	6c	0.4878(10)	0.9124(8)	0.7699(14)	1.0	2.1(3)
S3	2b	1/3	2/3	0.261(2)	1.0	1.5(4)

Табл. 2. Координати та ізотропні параметри теплового коливання атомів
у структурі сульфиду $\text{Nd}_{1.5}\text{Tb}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$

Атоми	ПСТ	x/a	y/b	z/c	КЗП	$B_{\text{ізо}} \times 10^2 (\text{ \AA}^2)$
R2	6c	0.1515(2)	0.3785(2)	0.0460(8)	0.5Nd + 0.5Tb	0.33(3)
Ga1	2a	0	0	0.266(3)	0.667	2.9(3)
Ga2	2b	1/3	2/3	0.6383(10)	1.0	0.1(4)
S1	6c	0.1028(9)	0.2461(9)	0.4825(13)	1.0	0.1(3)
S2	6c	0.4735(11)	0.9137(9)	0.771(2)	1.0	0.1(3)
S3	2b	1/3	2/3	0.286(3)	1.0	0.7(5)

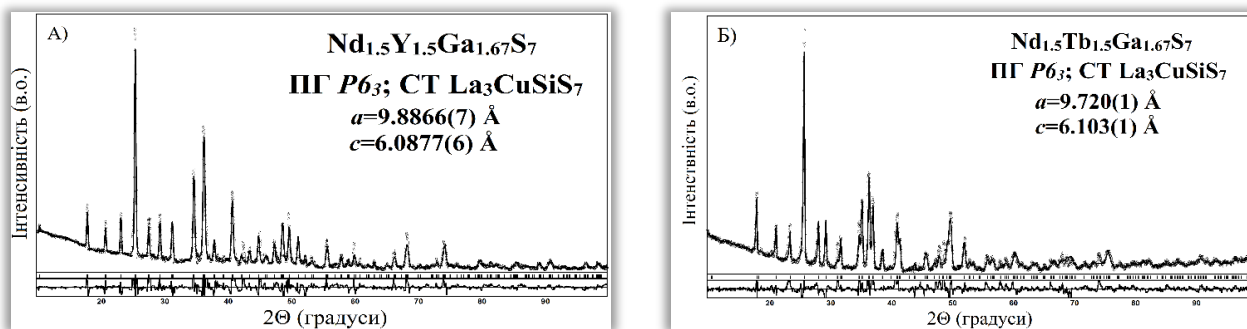


Рис. 1. Експериментальна і теоретична дифрактограми сульфідів $\text{Nd}_{1.5}\text{Y}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ (А), $\text{Nd}_{1.5}\text{Tb}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$ (Б) та їх різниці.

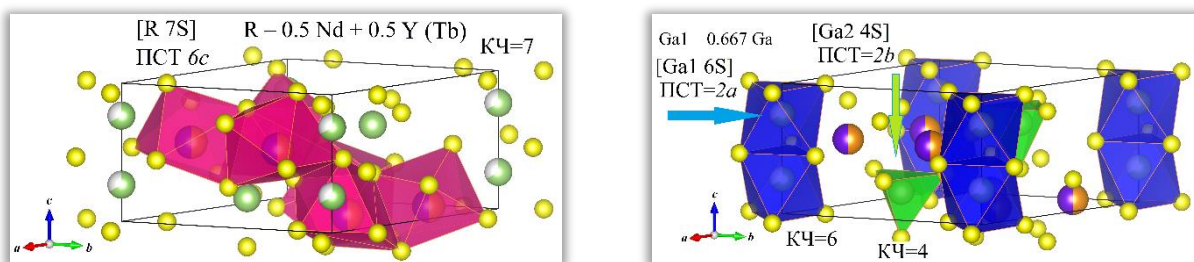


Рис. 2. Елементарна комірка та координаційні поліедри атомів R [Nd + Y(Tb)], Ga1 та Ga2 у структурі сульфідів $\text{Nd}_{1.5}(\text{Y/Tb})\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$.

1. L. Akselrud, Y. Grin, WinCSD: Software package for crystallographic calculations (Version 4), J. Appl. Cryst., 47, 803 (2014); DOI: 10.1107/s1600576714001058
2. K. Momma, F. Izumi, VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, J. Appl. Cryst., 44, 1272 (2011); DOI: 10.1107/S002188981103897

ОСОБЛИВОСТІ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОСТРУКТУРИ $\text{Pt/CdS/CdTe/Cu/GLASS}$ ОТРИМАНОЇ МЕТОДОМ ФІЗИЧНОГО ОСАДЖЕННЯ З ПАРОВОЇ ФАЗИ

І.В. Вакалюк¹, Р.С. Яворський¹, М.Д. Грицяк¹, В.Ф. Глеб¹,
Л.І. Никируй¹, С.А. Федосов²

¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57 м.
Івано-Франківськ 76018, Україна

²Луцький національний технічний університет, вул. Львівська, 75 м. Луцьк 43018, Україна
ivanna.maliarska@pnu.edu.ua

Технологія сонячних батарей, або фотоелектричних елементів, є важливою галуззю сучасної енергетики, що демонструє стрімкий розвиток. У найближчій перспективі вона відіграватиме значну роль у світовому виробництві електроенергії. Незважаючи на кілька етапів еволюції, найбільш поширеними залишаються сонячні елементи першого покоління, які виготовляються з монокристалічного та мультикристалічного кремнію. Це зумовлено їхньою високою стабільністю та широкою доступністю на ринку. Однак суттєвим обмеженням таких елементів є висока собівартість виробництва та відносно низький коефіцієнт перетворення енергії [1].

Тонкоплівкові сонячні елементи на основі CdS/CdTe є одними з найважливіших гетероструктур у фотоелектричних технологіях завдяки високому коефіцієнту перетворення енергії, з теоретичним ККД, прогнозованим у діапазоні 28%–30% [2], і досягнутим

експериментальним значенням понад 22%. Це пояснюється здатністю таких елементів поглинати більшість вхідних фотонів, високою стабільністю в експлуатації та відносно низькою вартістю виробництва. Сульфід кадмію (CdS) використовують як віконний шар завдяки широкій прямій забороненій зоні ($\sim 2,40$ eV), яка забезпечує прозорість у видимій області спектру, і провідності n-типу, що сприяє ефективному переносу світла до шару напівпровідника p-типу CdTe. Типова структура сонячного елемента CdS/CdTe включає товстий шар CdTe (5–10 мкм), що має майже оптимальну ширину забороненої зони ($\sim 1,45$ eV) і високий коефіцієнт поглинання ($\sim 10^5$ см $^{-1}$), що забезпечує ефективне перетворення сонячної енергії.

Тонкі плівки CdS і CdTe були отримані методом фізичного осадження з парової фази, який є одним із ключових методів виготовлення високоякісних тонкоплівкових сонячних елементів. Даний метод характеризується рядом переваг, серед яких відзначають простоту у виконанні, високу відтворюваність отриманих плівок, а також можливість регулювання температури процесу в широкому діапазоні. Крім того, цей метод забезпечує точний контроль товщини плівки, що є критично важливим параметром для оптимізації оптичних та електричних властивостей сонячних елементів на основі CdS/CdTe.

Наступним етапом роботи було нанесення фотоелектричної гетероструктури на основі CdS/CdTe. У якості нижнього контакту вибрано шар купруму, а у якості верхнього – шар платини. Осаджували матеріал на скляні підкладки.

На рисунку 1 наведено хімічний аналіз, отриманий за допомогою СЕМ дослідження.

Виконаний аналіз підтвердив, що процес термічного осадження у вакуумі спричинює активації дифузії сусідніх шарів відносно CdTe та змінює оптичні та електричні властивості цілої фотоелектричної гетероструктури. Різні дослідження вказують, що міжшарова дифузія на границях між осаджуваними шарами спричиняє утворення проміжних шарів потрібної компоненти. Однак, процеси такої дифузії ще досить мало вивчені. Дифузійні механізми стають інтенсивнішими за умови, коли структура перебуває під впливом освітлення чи температури. Залежно від товщини проміжного шару, його оптичних властивостей, електричні параметри системи можуть покращуватися чи погіршуються.

Слід мати на увазі, що така дифузія не призводить до формування окремого шару купруму чи сульфур. Як було показано у [3], дифузійні процеси спричиняють формування проміжних шарів типу Su_xTe чи $CdTe_{1-x}S_x$.

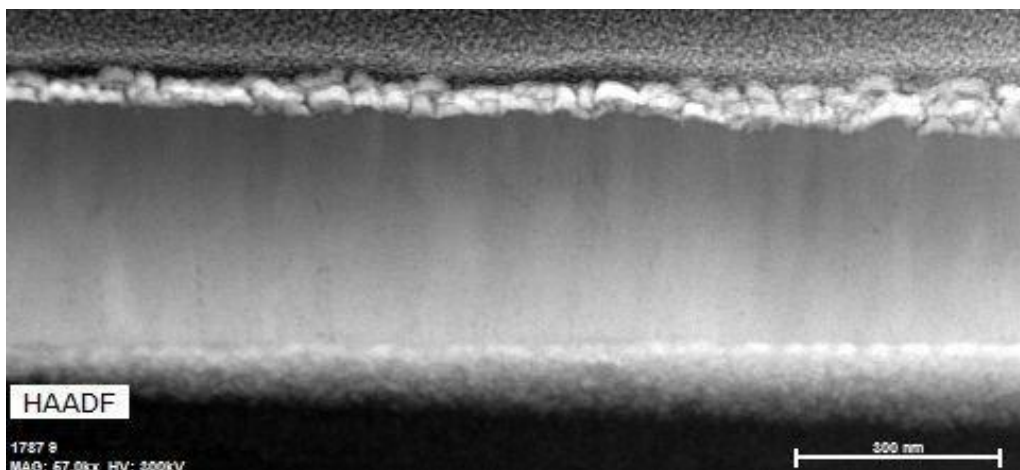


Рис. 1. СЕМ зображення високої роздільної здатності гетероструктури CdTe/CdS/Cu/glass.

Зважаючи на склад розглядуваної гетероструктури, спершу осаджується на скляну підкладку контактний шар купруму. Наступне осадження робочого шару CdTe здійснювали

при температурі підкладки близько 200°C . Таке нагрівання скляної підкладки спричинює випаровування частини атомів купруму із цього контактного шару. Проміжний шар Cu_xTe утворює зворотний контакт із нижчим питомим опором, формуючи сильно вироджені сполуки $p^+-\text{Cu}_x\text{Te}$ та наступний шар CdTe із легуючою домішкою Cu .

Механізм формування такого проміжного шару може бути наступним. Атоми Cu , які дифундують у об'єм CdTe займатимуть положення Cd , спричинюючи утворення Cu_2Te .

За умови тривалого заміщення, такий Cu_2Te замінюється на шар CuTe та вільні заряди Cu^{++} . Cu_2Te сприяє підвищенню рухливості основних носіїв на зворотному контакті, оскільки він є матеріалом p -типу із високою провідністю. Крім того, він додатково забезпечує добрий омичний контакт із CdTe .

Шар CuTe , навпаки, є поганим провідником і може спричинювати блокування руху дірок до контакту. Іони Cu^+ дифундують до по гетероструктурі через межі зерен. Шар Cu_2Te , хоча й характеризується найвищою провідністю, є нестабільним, тому він забезпечує дифузію Cu в плівки CdS і CdTe . Дифузія Cu в CdS викликає перекидання його через межі зерен, а дифузія Cu в плівку CdTe спричинює формування дефектів, які зменшують термін служби фотогенерованих носіїв. Таким чином, можна побачити, що коригуючи кількість надлишку атомів купруму, можна впливати на властивості гетероструктури. Так, надлишок Cu спричинює пониження ефективності через збільшення рекомбінації носіїв, якщо має місце дифузія надлишку Cu до передньої області, а також через вплив на висоту бар'єру. Таким чином, співвідношення Cu/Te є важливим параметром для дослідження характеристик фотоелектричної гетероструктури.

Відомо, що коефіцієнти дифузії металів досліджуваних бінарних сполук значно вищі, ніж у халькогену, є передумови формування перехідних проміжних шарів. Іншими словами, взаємодифузія матеріалів на межі розділу гетеропереходу CdS/CdTe може призвести до утворення дуже тонкого проміжного шару $\text{CdTe}_{1-x}\text{S}_x$. Цей проміжний шар утворюється з великим значенням x на стороні CdS і з меншим значенням x на стороні CdTe . Властивості цього шару впливають на оптичні властивості гетероструктури і він позитивно впливає на її фотоелектричну ефективність. Завдяки утворенню цього проміжного шару можна суттєво зменшити значну невідповідність ґратки між CdS ($a = 4,14 \text{ \AA}$ (в'юрцит) та $a = 54,57 \text{ \AA}$ (цинкова обманка)) і CdTe ($a = 5,84 \text{ \AA}$ (в'юрцит) та $a = 6,48 \text{ \AA}$ (цинкова обманка)), а також значення густини дефектів на межі розділу.

1. Imamzai M., Aghaei M., Thayoob Y. H. M., Forouzanfar M. (2012, November). A review on comparison between traditional silicon solar cells and thin-film CdTe solar cells. In Proceedings of National Graduate Conference (Nat-Grad). P. 1-5.

2. Mathur A.S.; Singh B.P. Study of effect of defects on CdS/CdTe heterojunction solar cell. Optik. 2020.V. 212. P. 164717

3. Houshmand M., Zandi M. H., Gorji N. E. SCAPS modeling for degradation of ultrathin CdTe Films: Materials interdiffusion. 2015. Jom. V. 67. P. 2062-2070

УДК 621.891:669.14.018.44:621.793

**ВПЛИВ РІЗНИХ ТИПІВ ПОКРИТТІВ ДЛЯ ПОКРАЩЕННЯ АНТИФРИКЦІЙНИХ ТА
АНТИПІТТІНГОВИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПАР ТЕРТЯ “НІТРИД КРЕМНІЮ” –
“ПІДШИПНИКОВА СТАЛЬ” (ОГЛЯД СТАНУ ПРОБЛЕМИ)
О.С. Васильчук, Д.С. Кустовський, С.П. Старик, А.Л. Майстренко**

*Інститут надтвердих матеріалів імені В.М. Бакуля, м. Київ, вул. Автозаводська 2,
ovasilchuk68@gmail.com*

На сьогодні підшипники кочення відіграють важливу роль у багатьох галузях промисловості, однак їхня продуктивність обмежується підвищеним тертям і зношуванням. Сучасні дослідження показують, що основними причинами виходу з ладу гібридних підшипників за стандартом ISO є абразивне зношування, приповерхнева втома, корозійне пошкодження від впливу вологи, адгезійне зношування та ерозія, спричинена витокami струму. Ці фактори відповідають приблизно за 70% поломок, виявлених під час аналізу підшипників. [1-2]. У більшості випадків також спостерігаються фреттинг-корозія у вигляді піттингів на поверхнях кульок і сталевих кільцях, хоч і в невеликих масштабах. Наукові дослідження спрямовані на підвищення довговічності гібридних підшипників, зниження витрат на їх технічне обслуговування і вирішення проблеми відсутності змащувальних систем у деяких умовах шляхом застосування спеціальних покриттів набувають все більшого значення.

В сучасних умовах використовують такі покриття для пар тертя «кераміка – сталь» як, алмазоподібний вуглець, нітрид титану, в якості мастильного матеріалу також застосовують дисульфід молібдену та ін [3-8]. Нанокристалічні алмазні (NCD) покриття на кераміці з нітриду кремнію (Si_3N_4) досліджено в роботі [3]. Авторами проводилось осадження NCD покриттів методом хімічного осадження з газової фази з гарячим дротом (HFCVD). Результати досліджень показали, що NCD покриття мають низький коефіцієнт тертя (0,02–0,03) після короткого початкового періоду з високим тертям. Товщина та якість покриття залежали від початкової шорсткості підкладки, і найбільша стійкість до деламінації досягалася на підкладках із шорсткою поверхнею. Загалом, NCD покриття продемонстрували високу зносостійкість у суворих умовах тертя.

Робота [4] присвячена дослідженню трибологічної поведінки підшипників кочення з глибокими канавками, які працюють в умовах сухого тертя. Для зниження тертя і підвищення зносостійкості внутрішніх і зовнішніх кілець підшипників застосовувалися два типи покриттів з модифікованих аморфних вуглецевих алмазоподібних плівок (DLC): з металевим допантом (а-С:Ме) та неметалевим (а-С:Н). Експериментально досліджувалися комбінації кілець із цими покриттями разом з керамічними (Si_3N_4) та сталевими (100Cr6) кулями. Результати показали, що комбінація покриття а-С:Н з керамічними кулями продемонструвала найкращу продуктивність, досягнувши встановленого часового ліміту без значного збільшення сили тертя. Аналіз зношування виявив різні механізми пошкоджень, що відкриває можливості для подальшого вдосконалення покриттів.

Автори роботи [5] представляють дослідження трибологічних властивостей кераміки з нітриду кремнію (Si_3N_4), покритої плівками DLC та DLC з кремнієм (DLC-Si), при взаємодії з нержавіючою сталлю 316L. DLC та DLC-Si покриття осаджувалися методом плазмоактивованого хімічного осадження з газової фази (PECVD) із суміші метану та силану при напругах автозміщення від -200 до -800 В. Дослідження проводилося для оцінки ефективності цих покриттів у зменшенні тертя та зносу при відсутності мастила, що є важливим у різних інженерних застосуваннях, наприклад, таких як автомобільна промисловість, підшипники та інструменти для обробки металів. Автори показали, що диски Si_3N_4 покриті DLC демонстрували значно кращі трибологічні властивості в порівнянні з

покриттями DLC-Si. Покриття DLC майже миттєво досягали стабільного режиму тертя з коефіцієнтом тертя близько 0,20–0,30. Коефіцієнт зносу для чистого DLC був на порядок нижчим (10^{-6} мм³/Нм), ніж у DLC-Si покриттів. Це свідчить про кращу зносостійкість і адгезію чистого DLC до підкладки з Si₃N₄. Вплив напруги автозміщення на трибологічні властивості DLC покриттів показав, що при -800 В отримуються більш низькі коефіцієнти тертя.

Стаття [6] присвячена дослідженню трибологічних властивостей DLC під час ковзання по собі, нітриду кремнію (Si₃N₄) та сталі. Дослідження охоплює вимірювання коефіцієнта тертя та швидкості зношування за різних умов навколишнього середовища. Авторами показано, що у сухому повітрі зношування нітриду кремнію і сталі, з покриттям DLC, є мінімальним завдяки утворенню захисного шару з матеріалу DLC. Проте, у вологому повітрі шар DLC деламінує, що призводить до більшого зношування.

Таким чином, покриття є перспективними у застосуванні для зменшення коефіцієнту тертя і продовження часу експлуатації гібридних підшипників. Подальші дослідження повинні бути спрямовані на вибір і оптимізацію технології нанесення покриттів, покращення їхньої адгезії до сталевих поверхонь та вивчення поведінки в умовах екстремальних навантажень. Також, окрім зменшення коефіцієнту тертя, залишається актуальним дослідження механізмів зношування при взаємодії пари тертя “Нітрид кремнію” – “Підшипникова сталь”, що в подальшому дозволить вдосконалювати властивості виробів з цих матеріалів.

1. ISO 15243. “Rolling bearings — Damage and failures — Terms, characteristics and causes Roulements — Détérioration et défaillance — Termes, caractéristiques et causes”, (2017), Geneva, Switzerland.
2. Current Status of Hybrid Bearing Damage Detection / P. J Dempsey et al. Tribology Transactions. 2005. Vol. 48, no. 3. P. 370–376. URL: <https://doi.org/10.1080/05698190591008568>.
3. Friction and wear performance of HFCVD nanocrystalline diamond coated silicon nitride ceramics / C. S. Abreu et al. Diamond and Related Materials. 2006. Vol. 15, no. 4-8. P. 739–744. URL: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2005.10.042>.
4. Analysing the Tribological Behaviour of DLC-Coated Dry-Running Deep Groove Ball Bearings with Regard to the Ball Material / J. Kröner et al. Applied Mechanics and Materials. 2016. Vol. 856. P. 143–150. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/amm.856.143>.
5. Tribological properties of silicon nitride ceramics coated with DLC and DLC-Si against 316L stainless steel / J. R. Gomes et al. Vacuum. 2007. Vol. 81, no. 11-12. P. 1448–1452. URL: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2007.04.023>.
6. Tribology of diamond-like carbon sliding against itself, silicon nitride, and steel / K. Jia et al. Materials Research Society. 1995. Vol. 10, no. 6. P. 1403–1410.
7. Diamond like carbon coatings for tribology: production techniques, characterisation methods and applications / Hainsworth S. V., Uhure N. J. International Materials Reviews. 2007. Vol. 52, no. 3. P. 153–174. URL: <https://doi.org/10.1179/174328007x160272>.
8. Effect of molybdenum disulphide upon the friction and wear in ceramic–steel pair / Morimoto T. Tribology International. 1997. Vol. 30, no. 12. P. 871–879. URL: [https://doi.org/10.1016/s0301-679x\(97\)00074-1](https://doi.org/10.1016/s0301-679x(97)00074-1).

УДК 678.744

ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ ТА РЕЖИМІВ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ОБРОБКИ ВУГЛЕЦЕВМІСНОЇ СИРОВИНИ

В.М. Ващинський

Національний університет «Львівська політехніка»

вул. Степана Бандери, 12, Львів, 79013, Україна, v.vashchynskyi@gmail.com

Актуальною проблемою сьогодення є розробка пристроїв для накопичення, перетворення та транспортування електроенергії. Серед таких пристроїв завдяки ряду характеристик (висока потужність, тривалий термін роботи) важливу нішу займають акумуляторні батареї та електрохімічні конденсатори (ЕК). При цьому енергоємнісні параметри ЕК тісно пов'язані з структурно-морфологічними характеристиками електродної компоненти, що використовується в них. Для виготовлення електродів таких накопичувачів зазвичай використовують активовані вуглечі з високорозвиненою площею поверхні та контрольованим розподілом пор за розмірами. Для отримання пористих вуглецевих матеріалів найчастіше використовують методи хімічної та термічної активації вуглецевмісної сировини. Варто зазначити, що властивості отриманих матеріалів істотно залежать від співвідношення активатор/прекурсор та самої природи вихідної сировини. В даній роботі здійснена спроба описати хімізм процесів, що протікають при отриманні активованих вуглеців, отриманих шляхом карбонізації та наступної хімічної активації рослинної сировини при температурі 300-900 °C.

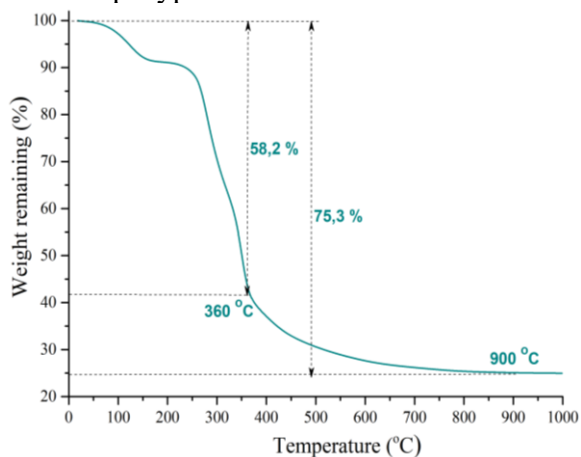


Рис. 1. Зміна маси подрібнених кісточок абрикосів у результаті нагрівання

Вуглецевмісними прекурсорами були використані сухі абрикосові кісточки, подрібнені до фракції 0,25–1 мм, в якості хімічного активатора вибрано гідроксид калію. Аналіз кривої (рис. 1) показує, що при температурах від 25°C до 360°C втрата маси вихідної сировини внаслідок нагрівання становить 58% від початкової маси внаслідок вигорання органічних сполук та випаровування води. Враховуючи, що основними її компонентами є целюлоза, геміцелюлоза та лігнін, можна стверджувати, що утворення карбонікатів відбувається в результаті їх термічного розкладу

При цьому на першому етапі піролізу (150 - 350 °C) проходить розкладання найменш стабільних сполук – пентозанів (основних складових геміцелюлоз) з виділенням у газову фазу води, кисневмісних газів та кислот (мурашиної і оцтової). Враховуючи кристалічну структуру глюкози та наявність водних зв'язків у її структурі, розкладання відбувається в інтервалі 325-375 °C. При розкладанні лігніну утворюються метанол та фенольні продукти (фенол, крезол та їх метилензаміщені похідні).

При подальшому підвищенні температури перераховані вище процеси сповільнюються. У діапазоні температур 650-900 °C процеси поліконденсації тривають з втратою кисню, водню, азоту та сірки. При температурах 650-800 °C триває карбонізація матеріалу та перетворення вуглецевої матриці, а саме, трансформація напівкоксової структури у кокс. Таким чином, на основі отриманих результатів встановлено, що для отримання активованих вуглеців з широким розподілом пор за розмірами та великою питомою поверхнею, необхідно здійснювати карбонізацію абрикосових кісточок при температурі 350-600 °C. При цьому вміст вуглецю в матеріалі становить близько 80 %.

**ДИЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛУ DMAAS+Cr У
НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ДІАПАЗОНІ**
О. Віра, Ю. Еліяшевський

*Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет, Львів, вул.
Драгоманова 50, olena.vira@lnu.edu.ua*

Синтез нових сегнетоелектричних матеріалів та модифікація властивостей існуючих сегнетоелектриків відкривають нові можливості для розвитку сучасних електронних пристроїв, методів зберігання інформації, використання сегнетоелектриків в якості фотовольтаїчних матеріалів [1]. Вивчення особливостей прояву сегнетоелектричної фази дозволяє вивчити електричні властивості таких матеріалів з перспективою широкого застосування у техніці. Одним з таких матеріалів є сегнетоелектричний кристал диметиламоніум алюміній сульфат гексагідрат $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Al}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (DMAAS). В останні роки цей кристал фактично став модельним об'єктом для вивчення сегнетоелектриків з органічним катіоном. Кристал широко досліджується різними експериментальними методиками, що дозволили зрозуміти природу структурних змін, яка пов'язана з динамікою органічних катіонів і неорганічних аніонів при пониженні температури [2]. При кімнатній температурі кристал DMAAS володіє сегнетоеластичними властивостями [3]. При пониженні температури до $T_{c1} = 152 \text{ K}$ у ньому спостерігається структурний фазовий перехід у сегнетоелектричну фазу, що можна віднести до типу лад-безлад [3]. При цьому спостерігається впорядкування системи органічних катіонів, що володіють дипольним моментом та з'являється макроскопічна спонтанна поляризація [4].

Попередні дослідження показують, що легування хромом Cr^{3+} (6,5%) вихідного кристалу DMAAS призводить до зсуву температури сегнетоелектричного фазового переходу, а саме, в легованому кристалі T_{c1} зсувається в бік вищих температур на 2,6 K [5]. Збільшення концентрації йонів хрому викликає фрагментацію сегнетоелектричних кластерів і зворотне зниження температури фазового переходу [6]. Варто відмітити, що кристал DMAAS + Cr володіє мультифероїчними властивостями з помітним ступенем магнітоелектричної взаємодії [6].

Для подальшого вивчення властивостей легованого хромом для кристалу DMAAS під час його синтезу здійснено часткове заміщення йонів алюмінію на хром з отриманням нового кристалу $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Al}_{1-x}\text{Cr}_x(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ з концентраціями хрому $x = 0,033$ та $0,047$. Проведено дослідження електричних властивостей DMAAS+Cr для різних концентрацій хрому (0,33% та 0,47%) у температурному проміжку 4.2-300 K у радіочастотному діапазоні. У температурному проміжку існування сегнетоелектричної фази виявлено фундаментальну сегнетоелектричну дисперсію. В температурному діапазоні сегнетоелектричного фазового переходу спостерігався типовий для сегнетоелектриків максимум діелектричної проникності. Підтверджено зсув температури сегнетоелектричного фазового переходу в бік нижчих температур при збільшенні концентрації хрому. Також було виявлено, що значення діелектричної проникності та тангенсу діелектричних втрат ($\text{tg } \delta$) суттєво залежать від концентрації хрому. Проведено аналіз отриманих температурних залежностей діелектричних параметрів на основі релаксаційної теорії Дебая в діапазоні радіочастот. Отримано атипову поведінку петель сегнетоелектричного гістерезису при пониженні температури кристалу до 65 K.

1. V. Kapustianyk, Yu. Eliyashevskyy, O. Vira, B. Turko¹, Zb. Czapla, Optical Materials, 151 (2024), 115347, [10.1016/j.optmat.2024.115347](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2024.115347)

2. N. Ostapenko, V. Kapustianyk, Yu. Eliyashevskyy, V. Rudyk, Zb. Czapl, V. Mokryi, J. Alloys and Compounds, 730 (2017), 417-423, [10.1016/j.jallcom.2017.09.319](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.09.319)

3. J. Banys, G. Volkel, R. Bottcher, D. Michel and Z. Czapla, Ph. Transition, 78 (2005), 337-349, [10.1080/01411590412331317095](https://doi.org/10.1080/01411590412331317095)
4. V. Kapustianik, Z. Czapl, R. Tchukvinskyi, A. Batiuk, Yu. Eliyachevsky, Yu. Korchak, and V. Rudyk, Physica Status Solidi, 201 (2003) 139-147, [10.1002/pssa.200306717](https://doi.org/10.1002/pssa.200306717)
5. V. Kapustianyk et. al., Acta Ph. Polonica Series, 127 (2015) 791-794, [10.12693/APhysPolA.127.791](https://doi.org/10.12693/APhysPolA.127.791)
6. V. Kapustianyk, et. al., Scientific Reports, 7 (2017), [10.1038/s41598-017-14388-8](https://doi.org/10.1038/s41598-017-14388-8)

УДК 539.3

ДЕФОРМІВНІСТЬ ЛИСТЯНИХ ПОРІД ДЕРЕВИНИ РІЗНОГО ВІКУ
Св.Св. Гомон¹, С.С. Гомон¹, О.В. Петренко²

¹Національний університет водного господарства та природокористування,
Рівне, Україна, e-mail: homonsviatoslav@ukr.net

²Національний університет «Львівська Політехніка», Україна,
e-mail: olekpetrenko23@gmail.com

Впродовж останніх років популярність виробів, матеріалів, конструкцій на основі деревини невідмінно зростає. Внаслідок такого швидкого зростання в світі запаси промислової деревини зменшуються, а також зменшується вік самих дерев в лісах. В багатьох випадках людство почало використовувати деревину меншого віку.

Тому, на нашу думку, необхідно провести експериментальні дослідження листяних порід деревини різної за віком. А також встановити вплив даного фактору на основні деформівні характеристики.

Мета експериментальних досліджень - це встановлення критичних деформацій деревини листяних порід стандартної вологості різного віку за осьового стиску уздовж волокон на сучасних випробувальних машинах.

Для вирішення поставленої перед нами задачі було виготовлено призми 1 сорту деревини перерізом 30x30x120 мм. Випробуванню піддавались наступні породи листяних порід деревини: береза, вільха, ясен. Вік деревини складав 20, 40, 60 років. Вологість була 12%. Висушування заготовок деревини проводили у спеціальних висушувальних камерах. Вологість деревини контролювалась за допомогою вологоміра. Призми випилювались із заздалегідь заготовлених довгих брусків. Загальна кількість випробуваних зразків була 63 шт. Експериментальні дослідження були проведені на сервогидравлічній випробувальній машині за осьового стиску вздовж волокон [1-4]. Режим навантажень – жорсткий (за приростом переміщень пресу випробувальної машини).

На основі проведеного експерименту були отримані відносні критичні деформації досліджуваних порід деревини (табл.1).

Табл. 1. Значення показників критичних деформацій деревини різного віку

№п/п	Порода деревини	К-сть призм шт.	Переріз зразків, мм	$u_{c,0,d,exp}$
Вік 60 років				
1	Береза	9	30x30x120	0,00525
2	Вільха	9	30x30x120	0,00450
3	Ясен	9	30x30x120	0,00610
Вік 40 років				
7	Береза	6	30x30x120	0,00509
8	Вільха	6	30x30x120	0,00431
9	Ясен	6	30x30x120	0,00597
Вік 20 років				
13	Береза	6	30x30x120	0,00441
14	Вільха	6	30x30x120	0,00302
15	Ясен	6	30x30x120	0,00504

Встановлено, що критичні відносні деформації незначно зменшуються від 60 до 40 років та суттєво від 40 до 20 років. Визначено, що критичні відносні деформації листяних порід зі зменшенням віку деревини від 60 до 20 років зменшуються, зокрема, для деревини берези на 19%, вільхи на 49 %, ясена на 21%.

1. Гомон Св.Св., Довбенко Т.О., Матвіюк О.В., Верешко О.В., Кулаковський Л.Я., Чорномаз Н.Ю. Аналіз випробувального обладнання для дослідження матеріалів за жорсткого режиму прикладання навантаження. *Містобудування та територіальне планування*. Київ: КНУБА, 2021. Вип. 78. С. 166-172.

2. Гомон С., Гомон П., Караван В. Експериментальні дослідження хвойних та листяних порід деревини одноразовим короткочасним навантаженням на стиск уздовж волокон за жорсткого режиму випробувань. *Вісник Львівського національного аграрного університету. Архітектура та сільськогосподарське будівництво*. Львів: ЛНАУ, 2020. №21. С. 34–40.

3. Gomon S.S., Savchuck V.O., Melnyk Yu.A., Vereshko O.V. Modern testing machines for investigation of wood and timber-based composite materials. *Сучасні технології та методи розрахунків у будівництві*. Луцьк: ЛНТУ, 2020. Вип.14. С. 73-80.

4. Гомон С.С., Гомон П.С. Побудова дійсних діаграм механічного стану деревини « σ - ϵ » суцільного перерізу ялини та берези за жорсткого режиму випробувань. *Ресурсоекономні матеріали, конструкції, будівлі та споруди*. Рівне: НУВГП, 2020. Вип. 38. С. 321–330.

SUPERCONDUCTIVITY IN SOME PSEUDO-CAGE COMPOUNDS

Roman Gumeniuk

Institut für Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, Leipziger Str. 23, 09599 Freiberg, Germany

Abstract. The cage compounds are intermetallics crystallizing with the structures of clathrates, filled skutterudites, Remeika- and Chevrel-types. They are characterized by a combination of ionic (weakly bounded cation inside enlarged void) and covalent (occurs within the framework) bonds, which frequently results in variety of topical physical behaviors. One of such phenomena is unconventional superconductivity known for strong electron-phonon coupling, two-gap mechanisms, time reversal symmetry breaking, spin-triplet pairing within Cooper pairs, etc. Investigating structural and physical properties of Remeika phases, we found some of them to reveal cubic, tetragonal, monoclinic and even modulated distortions of prototype arrangement. In following, we are trying to look for the influence of the structural changes on the superconducting mechanisms in structural motifs occurring in $Y_{3+x}Rh_4Ge_{13-x}$ [1] and $R_5Rh_6Sn_{18}$ ($R = Sc, Y$) [2-4]. Another topic of consideration is the $Ag_{1-x}Mo_6S_8$ Chevrel phase – a two-gap superconductor [5].

1. M. Feig et al., *Dalton Trans.*, 51 (2022) 4734.

2. V. Levytskyi et al., *Dalton Trans.*, (2022) accepted.

3. M. Feig et al., *Dalton Trans.*, 491 (2020) 6832.

4. M. Feig et al., *Phys. Rev B.*, 102 (2020) 024508.

5. M. Feig et al., *J. Phys.: Cond. Mat.*, 29 (2017) 495603.

УДК 548.736.4

ПЕРЕРІЗИ $\text{CeGe}_2\text{--}\{\text{Ho}, \text{Tb}\}\text{Ge}_2$

О. Т. Дармонук., З. М. Шпирка, Н. В. Герман, В. В. Павлюк

Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра неорганічної хімії, вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 м. Львів, Україна
olha.darmonuk@lnu.edu.ua

У літературі є відомості про дослідження потрійних систем $R\text{--}R'\text{--}\text{Ge}$, де R і R' – рідкісноземельний метал церієвої або ітрієвої підгрупи та окремих перерізів $R\text{Ge}_2\text{--}R'\text{Ge}_2$ [1–4]. Ці системи містять один спільний компонент – германій і два різних рідкісноземельних метали. Саме особливостями R -компонентів визначається характер взаємодії у цих системах.

Щоб доповнити відомості про взаємодію компонентів на перерізах, що відповідають бінарним дигерманідам РЗМ ми дослідили перерізи $\text{CeGe}_2\text{--}\{\text{Ho}, \text{Tb}\}\text{Ge}_2$. Синтезовано чотири зразки електродуговим сплавленням чистих металів, відпалювання здійснювали упродовж 720 годин за температури 600°C . Рентгенівський фазовий аналіз проводили за масивами порошкових даних, одержаних на дифрактометрі ДРОН-2.0М (проміння Fe $K\alpha$).

Результати рентгенівського фазового аналізу засвідчують, що зразки $\text{Tb}_{0,10}\text{Ce}_{0,24}\text{Ge}_{0,66}$ і $\text{Tb}_{0,20}\text{Ce}_{0,14}\text{Ge}_{0,66}$ містять одну фазу – $\alpha\text{-ThSi}_2$ (рис. 1) та є з області гомогенності НРТР між бінарними дигерманідами церію і тербію. Зразок складу $\text{Ho}_{0,18}\text{Ce}_{0,16}\text{Ge}_{0,66}$ – з області гомогенності твердого розчину на основі бінарного дигерманіду CeGe_{2-x} (структурний тип $\alpha\text{-ThSi}_2$), зразок $\text{Ho}_{0,12}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,66}$ – двофазний і містить фази зі структурою типу $\alpha\text{-ThSi}_2$ та AlB_2 . Обчислено параметри і об'єм елементарної комірки для синтезованих зразків (таблиця).

Морфологію поверхні зразків вивчали за допомогою скануючого електронного мікроскопа TESCAN Vega3 LMU. Кількісний склад порошоків досліджували за допомогою енергодисперсійного рентгенівського аналізатора Oxford Instruments (система Aztec ONE). На рис. 2. показано СЕМ-зображення полікристалічного зразка $\text{Ho}_{0,12}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,66}$. Рентген-флуоресцентну спектроскопію проводили з використанням лабораторного аналізатора ElvaX Pro. Елементний склад у зразках співпадає з теоретично заданим на початку експерименту. На рисунку 3 показано рентген-флуоресцентний спектр зразка $\text{Ho}_{0,12}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,66}$.

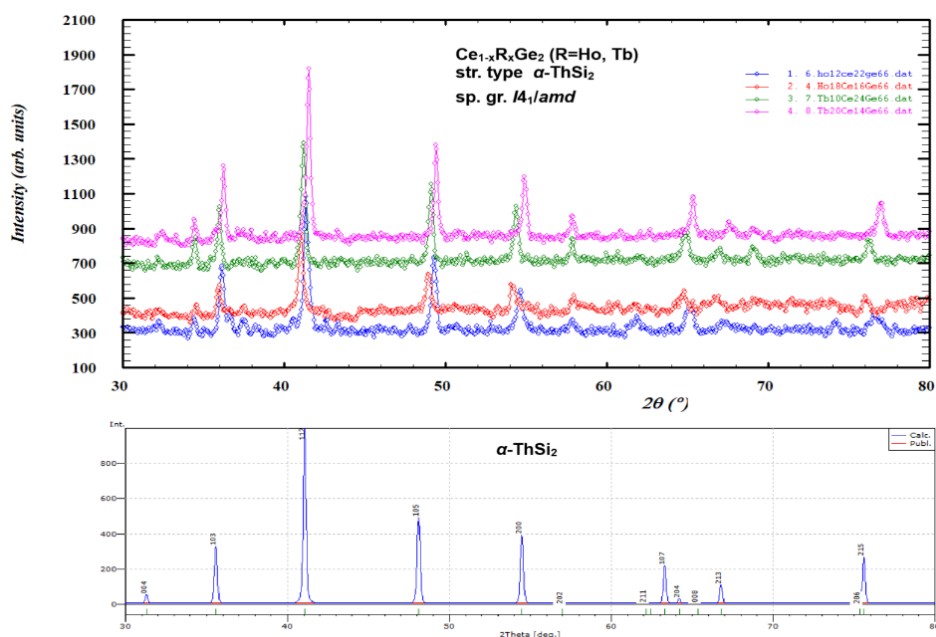


Рис.1. Спостережувані дифрактограми перерізів $\text{CeGe}_2\text{--}\{\text{Ho}, \text{Tb}\}\text{Ge}_2$

Табл. 1. Параметри та об'єм елементарної комірки сплавів перерізів $\text{CeGe}_2\text{--}\{\text{Ho}, \text{Tb}\}\text{Ge}_2$

Склад сплавів, ат. частки	Параметри комірки, Å		V, Å ³
	a	c	
$\text{Tb}_{0,10}\text{Ce}_{0,24}\text{Ge}_{0,66}$	4,226(4)	13,974(4)	250,0(1)
$\text{Tb}_{0,20}\text{Ce}_{0,14}\text{Ge}_{0,66}$	4,211(6)	13,923(5)	247,0(1)
$\text{Ho}_{0,12}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,66}$	4,225(7)	13,900(4)	247,0(5)
	3,937(4)	4,064(3)	54,5(5)
$\text{Ho}_{0,18}\text{Ce}_{0,16}\text{Ge}_{0,66}$	4,237(6)	14,019(2)	251,6(8)

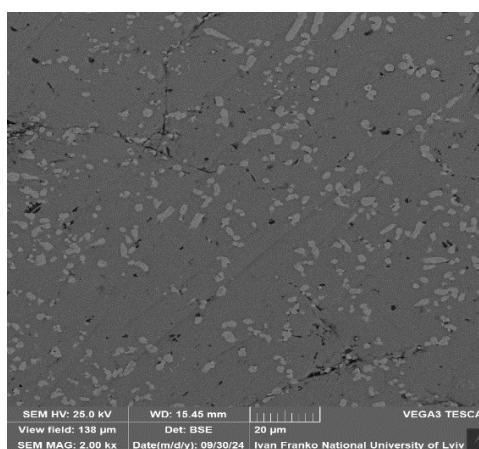


Рис. 2. СЕМ-зображення поверхні зразка $\text{Ho}_{0,12}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,66}$: сіра фаза (основна) – $\text{Ho}_{0,181}\text{Ce}_{0,197}\text{Ge}_{0,622}$, темно-сіра фаза – $\text{Ho}_{0,19}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,59}$, світла фаза – $\text{Ho}_{0,812}\text{Ce}_{0,072}\text{Ge}_{0,116}$.

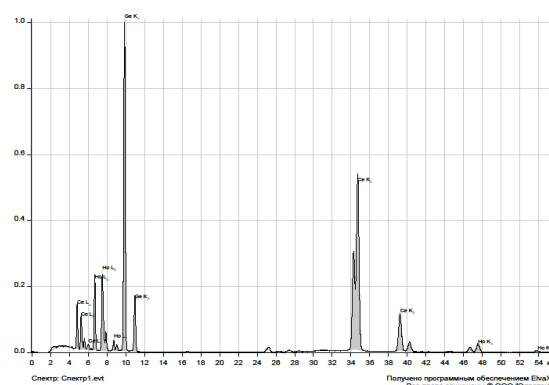


Рис. 3. Рентгенфлуоресцентний спектр зразка $\text{Ho}_{0,12}\text{Ce}_{0,22}\text{Ge}_{0,66}$.

1. Bodak O.I., Shpyrka Z.M., Mokra I.R. Peculiarities of the interaction of the components in the system of two rare earth metals and germanium. J. Alloys and Comp. 1997. Vol. 247. P. 217 – 222. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(96\)02589-3](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(96)02589-3).

2. Шпирка З., Драб Л. Дослідження перетинів $\text{DyGe}_2\text{--RGe}_2$, де $\text{R}=\text{Y}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{Lu}$. Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім. 2008. Вип.49, Ч. 1. С. 98 – 102.

3. Шпирка З., Чех Ю., Юзів О., Герман Н., Серкіз Р., Павлюк В. Рентгеноструктурне дослідження сплавів на перерізах $\text{RGe}_2\text{--LuGe}_2$ ($\text{R}=\text{Pr}, \text{Nd}$) та $\text{SmGe}_2\text{--R'Ge}_2$ ($\text{R}'=\text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$). Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім. 2019. Вип. 60. С. 64 – 72 <https://doi.org/10.30970/vch.6001.064>.

4. Кравчук О., Шпирка З., Герман Н., Павлюк В. Дослідження квазібінарного перерізу $\text{SmGe}_2\text{--LuGe}_2$. Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім. 2018. Вип. 59, Ч. I. С. 83 – 89 <https://doi.org/10.30970/vch.5901.083>.

Автори Шпирка З.М. та Павлюк В.В. вдячні за часткову фінансову підтримку Фонду Саймонса (ідентифікатор нагороди: 1290588).

VALENCE ELECTRONS CONCENTRATION AND COLOR OF INTERMETALLIC PHASES

G. Dmytriv¹, V. Pavlyuk¹, H. Ehrenberg², A. Mar³

¹*Ivan Franko National University of Lviv, Department of Inorganic Chemistry,
Kyryla & Mefodia str. 6, 79005 Lviv, Ukraine*

²*Karlsruhe Institute of Technology, Institute for Applied Materials,
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany*

³*University of Alberta, Department of Chemistry,
11227 Saskatchewan Dr NW, T6G 2N4 Edmonton, AB, Canada
grygoriy.dmytriv@lnu.edu.ua*

In nature, all metals are white or gray, and only two metals are enormously different: yellow gold and red copper. For this reason, colored alloys are so valuable for industry, especially for jewelry. At this moment, all alloys used in jewelry contain gold [1] and are very expensive.

In this work, we try to develop new alloys which do not contain gold and have different colors. As a model system, we choose Li-Ag-In, Li-Zn-Al, Li-Zn-Ga, Li-Zn-In, Li-Cu-Al, and Li-Cu-Ga.

In the system Li-Ag-In solid solution with a wide homogeneity range exists. A solid solution of Ag in the binary compound LiIn is formed by the combination of different types of atom substitution, and for this reason, we have a wide variety of valence electron concentrations in the homogeneity range (VEC). The colors of alloys of the Li-Ag-In system from the homogeneity range of the solid solution of Ag in the binary compound, LiIn, changed from gray via greenish-blueish, reddish-violet to golden-yellow. These changes in colors are strongly correlated with changes in VEC along different quasi-binary cuts in the Li-Ag-In system.

The following investigated systems are Li-Zn-Al, Li-Zn-Ga and Li-Zn-In. In the Li-Zn-Al and Li-Zn-Ga systems continuous solid solutions formed along quasi-binary cuts $\text{Li}(\text{Zn}_x\text{Al}_{1-x})$ and $\text{Li}(\text{Zn}_x\text{Ga}_{1-x})$, in the Li-Zn-In system limited solid solutions formed along the quasi-binary cut $\text{Li}(\text{Zn}_x\text{In}_{1-x})$. In all these quasi-binary cuts, the colors of alloys also changed with changes in VEC from gray to golden-yellow.

Despite the general tendency of the color gamut of alloys to change from yellow through red, violet, and blue tones to gray with increasing VEC, in the Li-Ag-In and Li-Zn-{Al,Ga,In} systems, there is a slight difference between them, as a result of which the alloys have different colors for the same VEC values. This phenomenon requires additional study.

Unfortunately, investigated alloys are very air-sensitive, and for this reason, optical properties were measured only for a few alloys: LiCu_2Al , LiCu_2Ga , Li_2ZnGa , and Li_2ZnIn .

Based on the optical reflectance spectra of the studied alloys and various industrial-colored gold alloys, the optical reflection was transformed into coordinates in the CIE 1931 color space (with standard light source E) and plotted on the chrominance diagram [2]. In this way, the colored intermetallics that can be obtained without precious metals and that would be attractive for use were determined: LiCu_2Al (red, CIE 1931 coordinates: $x = 0.329$, $y = 0.362$), LiCu_2Ga (yellow, CIE 1931 coordinates: $x = 0.412$, $y = 0.382$), Li_2ZnGa (violet, CIE 1931 coordinates: $x = 0.329$, $y = 0.309$) and Li_2ZnIn (light blue, CIE 1931 coordinates: $x = 0.309$, $y = 0.315$).

1. J. Liu, Y. Liu, P. Gong, Y. Li, K.M. Moor, E. Scanley, F. Walker, C.C. Broadbridge, J. Schroers, *Gold Bull*, 2015, DOI: 10.1007/s13404-015-0167-z

2. R.W.G. Hunt, M.R. Pointer, *Measuring Colour*, Wiley, 2011, ISBN: 978-1-119-97537-3

Acknowledgments

The authors GD and VP are greatly thankful to the Simons Foundation (Award ID: 1290588) for financial support.

УДК 621.396.22.029.7

ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ПОЧЕТВЕРЕННОГО СЕЛЕНІДУ $\text{Tl}_2\text{CdGeSe}_4$

Д.О. Іванюк¹, Л.В. Піскач², А.Г. Кевшин³, Н.А. Кевшин⁴

¹Аспірант Волинського національного університету імені Лесі Українки

²Професор кафедри неорганічної та фізичної хімії факультету хімії та екології Волинського
національного університету імені Лесі Українки

³Доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій
Волинського національного університету імені Лесі Українки

⁴Студент 2-го курсу Волинського національного університету імені Лесі Українки
dima.ivaniuk29@gmail.com, piskach.lyudmyla@vnu.edu.ua, ponchuk.g@gmail.com,
Kevsyin_A@ukr.net

Серед науковців велику увагу привертають до себе почетверенні халькогеніди, оскільки вони демонструють численні перспективи їх використання в різних технологічних і промислових застосуваннях. Зокрема, багато з таких матеріалів мають екологічно чисті атомні складові, відповідну пряму заборонену зону (близько 1,5 eV), великі значення коефіцієнта поглинання (вище 10^4 см^{-1}), електропровідність p -типу. Ці властивості стимулюють розвиток різноманітних технологій їхнього застосування як ефективних поглиначів для тонкоплівкових сонячних елементів, термоелектричних, фотоелектричних, спінтронних і нелінійно оптичних сполук, а також як перспективних матеріалів для перетворення води на газоподібний водень шляхом фотокаталітичного розщеплення води [1].

Почетверенна сполука $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$, яка утворюється в системі $\text{Tl}_2\text{SnSe}_3\text{--CdSe}$ в перитектичному процесі $L + \beta \leftrightarrow \text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ при 860 K, була виявлена зовсім недавно у вигляді полікристалічного зразка [2]. Знання про електронну структуру та особливості утворення хімічних зв'язків у твердому тілі відіграють вирішальну роль для розуміння його фізичних/хімічних властивостей і прогнозування способів їх модифікації для адаптації до спеціальних технологічних вимог [3].

Для вирощеного кристала $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ ми виконали дослідження його електронної структури та хімічного зв'язку з використанням можливостей рентгенівської фотоелектронної спектроскопії (XPS). Крім того, ми реалізували ab initio обчислення зонної структури в рамках теорії функціоналу щільності (DFT) і розглядали характерні обмінно-кореляційні (XC) потенціали для виявлення найкращого збігу кривих теоретичної густини станів (DOS) з експериментальним спектром валентної зони XPS кристала $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$. Після знаходження найкращої відповідності між теоретичними спектрами DOS та експериментальним спектром XPS валентних електронів, ми виконали обчислення основних оптичних констант. XPS-спектри кристала $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ були отримані з використанням для збудження рентгенівської трубки $\text{Mg K}\alpha$ ($h\nu = 1253,6 \text{ eV}$) і встановлення постійної енергії проходження 35 eV.

Рентгеноструктурний аналіз показав, що $\text{LT-Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ кристалізується в тетрагональній симетрії $SG I4_2m$ з параметрами елементарної комірки $a = 8,0480 (8) \text{ \AA}$, $c = 6,8569 (2) \text{ \AA}$. Ці результати XDR для кристала $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ добре узгоджуються з результатами, отриманими для полікристалічного зразка $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ [4].

Поточні теоретичні дані для кристалічної структури $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ щодо параметра решітки та положення атома в елементарній комірці узгоджуються з поточними експериментальними даними XRD для монокристалу, а також для полікристалічного зразка $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$. Крім того, встановлено, що довжини зв'язків Cd--Se (2,587 $\text{ \AA}$) та Sn--Se (2,605 $\text{ \AA}$), оцінені для даних теоретичної кристалічної структури $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$, наведених у таблиці 1.9, добре відповідають довжинам, визначеним експериментально, а саме Cd--Se (2,58 $\text{ \AA}$) та Sn--Se (2,63 $\text{ \AA}$). Кристалічна структура сполуки $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ представлена на рис. 1.а.

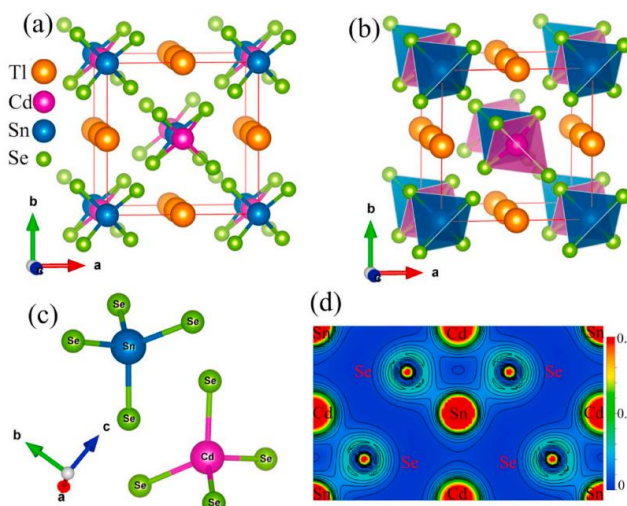


Рис. 1. (а) Кристалічна структура $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ (обведена елементарна комірка), (b) розташування тетраедрів CdSe_4 і SnSe_4 у цій структурі, (c) найближче оточення атомів Cd і Sn атомами селену, (d) розрахована густина електронного заряду вздовж кристалографічної площини $(1\ 1\ -\ 0)$ [Примітка: на панелі (d) чорні контурні лінії представлені для густин електронів, що змінюються від 0 до $0,4\ \text{e}/\text{Bohr}^3$ з кроком $0,02\ \text{e}/\text{Bohr}^3$].

У цій структурі атоми талію розташовані в 4(c) позиції, атоми кадмію та олова заповнюють 2(b) і 2(a) позиції відповідно, тоді як атоми селену розміщені в 8(i) позиції. Атоми кадмію та олова мають чотири атоми селену як найближчих сусідів, які утворюють тетраедри CdSe_4 та SnSe_4 відповідно (рис. 1.c). Розташування тетраедрів CdSe_4 та SnSe_4 у структурі $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ представлено на рис. 1.b.

1. M.S. Kumar, S.P. Madhusudanan, S.K. Batabyal. Substitution of Zn in Earth-Abundant $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ based thin film solar cells. *Solar energy mater, Sol. Cell.* 2018. Vol. 18. P. 287–299.
2. A.O. Selezen, L.V. Piskach, O.V. Parasyuk, et al. The Tl_2SnSe_3 -CdSe System and the Crystal Structure of the $\text{Tl}_2\text{CdSnSe}_4$ Compound. *J. Phase Equilibria Diffus.* 2019. Vol. 40, № 6. P. 797–801.
3. O.Y. Khyzhun, V.L. Bekenev, V.A. Ocheretova, A.O. Fedorchuk, O.V. Parasyuk, Electronic structure of $\text{Cu}_2\text{ZnGeSe}_4$ single crystal: ab initio FP-LAPW calculations and X-ray spectroscopy measurements. *Phys. B.* 2015. Vol. 461. P. 75–84.
4. O.V. Parasyuk, V.S. Babizhetskyy, O.Y. Khyzhun, V.O. Levytsky, I.V. Kityk, G. L. Myronchuk, O.V. Tsisar, L.V. Piskach, J. Jedryka, A. Maciag, M. Piasecki. Novel quaternary $\text{TlGaSn}_2\text{Se}_6$ single crystal as promising material for laser operated infrared nonlinear optical modulators. *Crystals.* 2017. Vol. 7. P. 341.

NEW LUMINESCENCE MATERIALS BASED ON HALIDE DOUBLE PEROVSKITES

I. A. Ivashchenko^{*1}, L. D. Gulay², V.V. Halyan², L. Piskach²,
V.O. Yukchymchuk³, K. Matras-Postolek¹

¹*Faculty of Chemical Engineering and Technology, Cracow University of Technology, Warszawska
St. 24, 31-155 Cracow, Poland*

²*Lesya Ukrainka Volyn National University, Voli Ave. 13, 43000 Lutsk, Ukraine*

³*V.E. Lahskaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences,
Prospekt Nauky 41, Kyiv 03028, Ukraine*
iivashchenko@pk.edu.pl

Halide double perovskites, $\text{Cs}_2\text{B}^{\text{I}}\text{B}^{\text{III}}\text{Cl}_6$, which include a pair of non-toxic metal cations replacing two toxic lead cations ($\text{B}^{\text{I}}\text{B}^{\text{III}} \rightarrow 2\text{Pb}^{\text{II}}$) in CsPbCl_3 , are promising alternatives, where $\text{B}^{\text{I}} - \text{Na, Ag}$; $\text{B}^{\text{III}} - \text{In, Sb, Er}$ [1-3]. The stable lead-free double perovskites were synthesized using composition engineering and two methods of synthesis: precipitation and hydrothermal techniques. Alloying and doping form stable bright emissive centres and HDPs can emit efficient white luminescence in the form of self-trapped excitons (STEs) and therefore can be used as cheap white phosphors [3]. A combination of visible STE radiation and multiple near-infrared emissions of Er^{3+} will cover the Vis-NIR gamut. Two series of the samples with compositions: $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.4}\text{Na}_{0.6}\text{In}_{0.9-x}\text{Sb}_{0.1}\text{Cl}_6 \cdot x\text{ErCl}_3$, $x = 0.1; 0.3; 0.5; 0.7$; $\text{Cs}_2\text{NaIn}_{0.9-x}\text{Sb}_{0.1}\text{Cl}_6 \cdot x\text{ErCl}_3$, $x = 0.1; 0.3; 0.5; 0.7$ were prepared. The samples crystallize in the cubic (Sp. Gr. $Fm-3m$) or tetragonal syngony, Sp. Gr. $I4/mmm$, according to the XRD results. The compositions were investigated using EDX, and the microstructure of the samples was researched with SEM technique. Raman spectra of $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{NaInCl}_6$ and $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.4}\text{Na}_{0.6}\text{InCl}_6$ were obtained using laser radiation with different wavelengths of 457, 532, and 671 nm. The Raman spectra exhibit four vibrational modes: A_{1g} , E_g , and $2F_{2g}$, according to the selection rules for $A_2\text{B}^{\text{I}}\text{B}^{\text{III}}\text{X}_6$ double perovskites. For the doped samples the obtained Raman modes provide evidence for the incorporation of Sb^{3+} and Er^{3+} in the host lattice of HDPs with respective effects on the normal modes of vibration.

Photoluminescent properties were also investigated in the range of 300-2000 nm. The maximum of the perovskite emission peak varied from 450 nm for sodium containing HDPs to 580 nm for silver-sodium containing HDPs. Additionally, PL bands which correspond to the transitions in the f-shells of Er^{3+} ions, were observed. Redistribution of photoluminescence intensity between perovskite and erbium-containing radiation centers including a mechanism of STE emission were discussed. Moreover, influence of the method of synthesis and compositions on the optical properties of the samples were discussed.

1. Y. Liu, A. Nag, L. Manna, Zh. Xia Lead-Free Double Perovskite $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 11592– 11603.
2. O. Stroyuk, O. Raievska, J. Hauch, Ch. J. Brabec Doping/Alloying Pathways to Lead-Free Halide Perovskites with Ultimate Photoluminescence Quantum Yields. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, e202212668
3. Y. Wu, X. Li, H. Zeng Lead- Free Halide Double Perovskites: Structure, Luminescence, and Applications *Small Struct.*, 2021, 2, 2000071.

UDC 546.05+544.6+621.355

LaNi₅ DOPPED WITH Zr, Mg AND Sn: SYNTHESIS, PHASE ANALYSIS AND ELECTROCHEMICAL HYDROGENATION

I.V. Kalytovskii, O.Ya. Zelinska, V.M. Kordan, A.V. Zelinskiy, V.V. Pavlyuk

*Department of Inorganic Chemistry, Ivan Franko National University of Lviv,
Kyrylo i Mefodiy St. 6, 79005 Lviv, Ukraine
oksana.zelinska@lnu.edu.ua*

Multicomponent alloys of rare earth and transition elements with the composition AB₅ are well known for their hydrogen sorption properties and are widely used in hydrogen storage devices and nickel-metal hydride batteries. Their famous binary representative, LaNi₅ (CaCu₅-type structure), has sufficient interatomic space (octahedral and tetrahedral voids) to incorporate hydrogen atoms. Its theoretical energy capacity reaches 375 mAh/h, while the experimentally achieved value is three times less. Among the disadvantages of this phase are the ability to degrade in alkaline electrolyte solutions, the insufficient number of charge-discharge cycles during electrochemical processes, and the high cost. Alloying this material with Mn, Fe, Co, Cu, Mg, Al, Sn, etc. increases its corrosion resistance and energy consumption and lowers costs. Therefore, the purpose of this work is to synthesise an alloy based on LaNi₅ alloyed with zirconium, magnesium and tin, to study its phase composition and effectiveness of electrochemical hydrogenation.

The synthesis of the alloy was carried out by arc melting of pure metals (> 99,9 %) under an argon atmosphere. An excess of magnesium up to 10 wt.% was added to cover its losses during melting. For homogenization, the alloy was sealed in a silica ampule under vacuum, annealed at 400°C for two weeks and quenched in cold water without breaking the ampoule. X-ray phase analysis was performed based on powder data obtained on the diffractometer DRON-2.0M (Fe K α -radiation, 20° ≤ 2 θ ≤ 120°) using PowderCell-2.4 software. Full-profile refinement of the powder pattern was carried out using the Rietveld procedure and FullProf Suite software. Electrochemical hydrogenation of the alloy was carried out in a two-electrode Swagelok-type cell. A well-grained powder of the synthesized alloy pressed into a pellet and soaked in the electrolyte (6 M KOH) acted as an anode. A finely dispersed Ni(OH)₂ with the addition of graphite in the ratio of 9:1 served as a cathode. The anode and cathode spaces were split up by a separator made of pressed cellulose and impregnated with the electrolyte. The sample was tested in galvanostatic mode (Galvanostat MTech G410-2). The surface morphology of the sample before and after electrochemical hydrogenation was investigated using the TescanVega3 LMU electron microscope with the Oxford Instruments EDX system.

X-ray phase analysis confirmed the formation of the phase La_{0.7}Zr_{0.3}Ni_{4.4}Mg_{0.3}Sn_{0.3}, which, like the binary prototype, crystallizes in a CaCu₅-type structure (space group *P6/mmm*, Pearson code *hP6*, *a* = 0.5019(2) nm, *c* = 0.4036(2) nm, *V* = 0.0881(1) nm³). In addition to the main phase, reflections from ZrNi₂ (MgCu₂-type structure, space group *Fd-3m*) are present on the powder pattern of the sample, but it does not affect the hydrogenation process, as electrochemical studies have shown, though it also has hydrogen-sorbing behaviour. The first cycles of electrochemical hydrogenation of the sample showed that it intercalates hydrogen quite well, demonstrating high efficiency and discharge time (7th cycle: *t*_{disch.} ≈ 3.8 h, η = 96 %). After 50 charge-discharge cycles, we observed partial amorphization of the electrode material, as evidenced by the changes in the morphology and composition of the grains, which we confirmed by SEM and EDX-analysis, but the structure of the material remained stable throughout the hydrogenation procedure.

This research was funded by the National Research Foundation of Ukraine (2022.01/0064).

PACS: 78.30.-j; 78.67.Bf; 61.46.Df; 63.22.-m

RAMAN SPECTROSCOPY OF Fe_3O_4 AND $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}$ NANOPARTICLES AT DIFFERENT EXCITATION WAVELENGTHS

O. Kapush¹, O. Ivakhno-Tsehelnik^{2,3}, O. Selyshchev^{2,3}, V.M. Dzhagan^{1,4}, N. Mazur¹,
S. Kondratenko⁴, V.V. Dzhahan⁴, V. Yukhymchuk¹, M.Ya.Valakh¹, D.R.T. Zahn^{2,3}

¹V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 45 Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine

²Semiconductor Physics, Chemnitz University of Technology, D-09107 Chemnitz, Germany

³Center for Materials, Architectures and Integration of Nanomembranes (MAIN), Technical University of Chemnitz, Chemnitz, Germany

⁴Physics Department, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine, dzhagan@isp.kiev.ua

Colloidal $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}(\text{Ag})$ nanoparticles (NPs) have been intensively investigated in the past decade for numerous applications such as hyperthermic treatment of tumors, targeted delivery of drugs, surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), etc. [1,2]. Most research has been devoted to testing different NP morphologies and analytes. Much less attention has been paid to gaining a deeper understanding of the physical and chemical properties of these systems, in particular how their magnetic and plasmonic parts may influence each other.

Here, we synthesized Fe_3O_4 NPs (Fig.1a) by a modified Massart's method [3] and used them as a basis of $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}$ NPs which were obtained by direct metal reduction on the surface of the ferrite NP. The obtained NPs exhibit a strong ferro-/ferrimagnetic response (Fig. 1b). The NPs were characterized by vibrational Raman, UV-vis absorption, electron spin resonance, and X-ray photoelectron spectroscopies. Raman scattering spectroscopy revealed a characteristic vibrational (phonon) peak near 670 cm^{-1} , confirming the Fe_3O_4 crystalline structure of the NPs. The dependence of both the peak intensity and its spectral position on the excitation wavelength (λ_{exc}) used in the Raman scattering was observed for the first time. This effect may be an indication of resonance effects or dispersion of the structural properties of the NPs in the ensemble.

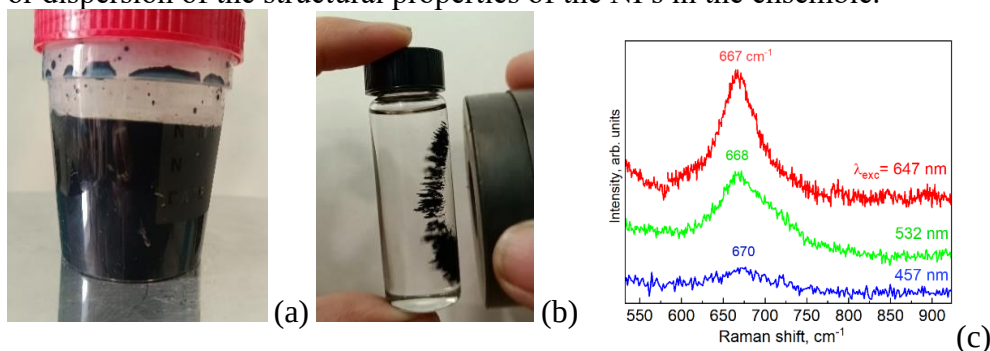


Figure 1.
As-synthesized Fe_3O_4 colloidal NPs (a), the same NPs transferred into toluene (b), Raman spectra of the NPs at different λ_{exc} (c).

This project was supported by the Ukrainian-Lithuanian project “Exploring magnetoplasmonic interactions in $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}(\text{Ag})$ nanoparticles for multifunctional SERS applications”.

1. I. Mukha, O. Chepurna, N. Vityuk, et al, Multifunctional magneto-plasmonic $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Au}$ nanocomposites: approaching magnetophoretically-enhanced photothermal therapy // Nanomaterials-2021.-11-P.1113.

2. G. Sirgedaite, M. Talaikis, G. Niaura, L. Mikoliunaite. Magneto-plasmonic nanostructures for SERS: magnetite decorated by silver and gold nanoparticles // New J. Chem.-2023.-47.-P.402.

3. R. Massart. Preparation of aqueous magnetic liquids in alkaline and acidic media // IEEE Transactions on Magnetics-1981.-17.-P.1247 – 1248.

STUDY OF THE NOVEL TERNARY PHOSPHIDES BY SINGLE CRYSTAL METHOD O. R. Karychort^{1,2}, N. Yu. Buriak¹, O. V. Zhak, Yu. M. Prots² and Yu. M. Grin²

¹ Ivan Franko National University of Lviv, Lviv, Ukraine

²Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany

Oksana.Karychort@lnu.edu.ua

The ternary systems *RE-M-P* containing the rare earth (*RE*), transition metal (*M*) and phosphorus are characterized by a large variety of structure types. Almost every one of these systems has the representatives of the ThCr_2Si_2 , TiNiSi , $\text{Hf}_2\text{Co}_4\text{P}_3$ and $\text{Zr}_2\text{Fe}_{12}\text{P}_7$ structure types [1], while some of them have only one representative.

The $\text{Hf}_2\text{Co}_4\text{P}_3$ structure is common in *RE-T-P* systems and closely related to $\text{Ho}_5\text{Ni}_{19}\text{P}_{12}$, $\text{Sc}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$, $\text{Nd}_5\text{Cu}_{17.8}\text{P}_{12}$, $\text{Ce}_5\text{Cu}_{19}\text{P}_{12}$. The $\text{Ho}_5\text{Ni}_{19}\text{P}_{12}$ structure ($Z = 1$) is formed from the $\text{Hf}_2\text{Co}_4\text{P}_3$ structure ($Z = 4$) as a result of the substitution of rare earth atoms by transition metal atoms at the $3k$ ($x00$) position. Worth to note that in some *RE-T-P* systems the formation of $\text{RE}_2\text{T}_4\text{P}_3$ – $\text{RE}_5\text{T}_{19}\text{P}_{12}$ pairs have been observed, notably $\text{Sc}_5\text{Co}_{19}\text{P}_{12}$ – $\text{Sc}_2\text{Co}_4\text{P}_3$, $\text{Sc}_5\text{Ni}_{19}\text{P}_{12}$ – $\text{Sc}_2\text{Ni}_4\text{P}_3$, $\text{Zr}_5\text{Co}_{19}\text{P}_{12}$ – $\text{Zr}_2\text{Co}_4\text{P}_3$, $\text{Hf}_5\text{Co}_{19}\text{P}_{12}$ – $\text{Hf}_2\text{Co}_4\text{P}_3$ and $\text{Gd}_5\text{Co}_{19}\text{P}_{12}$ – $\text{Gd}_2\text{Co}_4\text{P}_3$ [1], suggesting the formation of a series of solid solutions.

The mixtures of the starting components (powders of rare earth metals, palladium and red phosphorus, all with a declared purity better than 99.95 wt%) were pressed into a pellet under a pressure of 5 MPa to produce the samples of the new phosphides. The samples were placed in a lidded alumina crucible. To reduce the reaction volume, another crucible of smaller size was placed inside. The samples were then sealed in a silica tube containing Ar at 0.4 bar, and heated to 1000 °C for 72 h, then sintered for 5 days and slowly cooled to 100 °C for 12 h. The single crystals of the new phosphides were mechanically extracted from the crushed samples. X-ray data collection was performed at room temperature using a Rigaku AFC7 diffractometer equipped with a Saturn 724+ CCD detector (MoK α radiation, $\lambda = 0.71073$ Å).

New ternary compounds $\text{Gd}_2\text{Pd}_{12}\text{P}_7$ and $\text{Tb}_2\text{Pd}_{12}\text{P}_7$ are the first representatives of the $\text{Zr}_2\text{Rh}_{12}\text{P}_7$ -type structure (space group $P63/m$) among ternary phosphides of rare earth metals and palladium. Phosphides $\text{Ho}_2\text{Pd}_4\text{P}_3$ and $\text{Dy}_{2-x}\text{Pd}_{4+x}\text{P}_3$ representative the $\text{Hf}_2\text{Co}_4\text{P}_3$ -type structure (space group $P-62m$), but the phosphide $\text{Dy}_{2-x}\text{Pd}_{4+x}\text{P}_3$ ($x = 0.15$) reveals the partial substitution of the atoms of rare earth metal by palladium. Refined lattice parameters and residuals are:

$a = 9.6991$ Å, $c = 3.9781$ Å; $R_F = 0.0332$; $wR_F = 0.0392$ for **Gd₂Pd₁₂P₇**

$a = 9.7114$ Å, $c = 3.9598$ Å; $R_F = 0.0372$; $wR_F = 0.0348$ for **Tb₂Pd₁₂P₇**

$a = 13.1333$ Å, $c = 4.0032$ Å, $R_F = 0.0377$; $wR_F = 0.0382$ for **Dy_{2-x}Pd_{4+x}P₃ ($x = 0.15$)**

$a = 13.1727$ Å, $c = 4.0150$ Å, $R_F = 0.0266$; $wR_F = 0.0278$ for **Ho₂Pd₄P₃**.

1. Villars P., Cenzual K., Eds. Pearson's Crystal Data: Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (Release 2019/20); ASM International®: Materials Park, Ohio (USA), 2019.

Acknowledgements

O. Karychort and O. Zhak thanks for financial support EURIZON H2020, g. a. No. 871072 and to Simons Foundation (Award Number: 1037973).

PACS: 78.30.-j; 78.67.Bf; 61.46.Df; 63.22.-m

RAMAN SPECTROSCOPY STUDY OF Cu_2XSnS_4 (X = Fe, Ni, Zn) NANOCRYSTALS SYNTHESIZED BY MILD CHEMICAL ROUTE

A. Karnaukhov¹, O. Kapush¹, N. Mazur¹, O. Selyshchev^{2,3}, L.I. Trishchuk,¹
S. Kondratenko⁴, V. Yukhymchuk¹, M.Ya.Valakh¹, O. Ivakhno-Tsehelnik^{2,3}, V. Dzhagan¹,
D.R.T. Zahn^{2,3}

¹V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 45
Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine

²Semiconductor Physics, Chemnitz University of Technology, D-09107 Chemnitz, Germany

³Center for Materials, Architectures and Integration of Nanomembranes (MAIN), Technical
University of Chemnitz, Chemnitz, Germany

⁴Physics Department, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine,
dzhagan@isp.kiev.ua

$\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ (CZTSSe) is among the materials most intensively studied for various potential energy applications [1]. The main advantages are their high absorption coefficient ($\sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$), appropriate bandgaps, nontoxic and affordable constituent elements. Colloidal nanocrystals (NCs) are promising for large-area manufacturing of CZTSSe thin-film solar cells, especially on flexible substrates, compatible with printing technologies [2]. However, there is a high probability of defects and impurity phases (Cu_xS , ZnS , etc) in CZTSSe [3]. One of the approaches to stabilize the quaternary phase and eliminate defects is a partial or complete replacement of (one or two) cations. Furthermore, complete or partial substitution of the cations can result in new useful properties. Until now, most works have focused on the substitution of Cu (for Ag) and Sn (for Ge) [1], while the substitution of Zn, especially for magnetic ions, was less studied [4].

In this work, we compare the NCs of Cu_2XSnS_4 (X = Fe, Ni, Zn) synthesized at mild conditions (ambient pressure and temperature $< 100^\circ\text{C}$) following our receipt developed earlier for CZTS [5]. Raman spectroscopy was used as the main characterization method, because it is informative about the structure of this type of compounds and does not demand special preparation or large volume of the samples. $\text{Cu}_2(\text{Fe},\text{Zn})\text{SnS}_4$ and $\text{Cu}_2(\text{Ni},\text{Zn})\text{SnS}_4$ showed different trends with an increase in the ratio of Fe or Ni to Zn. In the case of iron, no pure $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$ compound could be obtained (Cu_3SnS_4 and Cu_2SnS_3 phases formed instead), although distinct Raman spectra of the quaternary compound could be obtained at the intermediate composition of $\text{Cu}_2(\text{Fe},\text{Zn})\text{SnS}_4$. In the case of nickel, the opposite situation occurred – the spectrum of pure $\text{Cu}_2\text{NiSnS}_4$ was rather distinct, while the worse structural quality was observed for the mixed compositions $\text{Cu}_2(\text{Ni},\text{Zn})\text{SnS}_4$. Some additional differences were observed at different laser excitations (457, 532, 671, and 785 nm), which will be discussed in terms of the resonance effects and possible size and phase inhomogeneity of the obtained NCs.

The work was supported by the DFG project ZA 146/59-1 (517869265).

1. Kush P. and Deka S. Multifunctional Copper-Based Quaternary Chalcogenide Semiconductors Toward State-of-the-Art Energy Applications. *ChemNanoMat* 2019, V. 5, PP. 373 – 402.
2. Stroyuk, O.; Raevskaya, A.; Gaponik, N. Solar Light Harvesting with Multinary Metal Chalcogenide Nanocrystals. *Chem. Soc. Rev.* 2018, V.7, PP. 5354–5422.
3. Selyshchev O. et al. Raman and X-ray photoemission identification of colloidal metal sulfides as potential secondary phases in nanocrystalline $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ photovoltaic absorbers. *ACS Appl. Nano Mater.* 3 (6), 5706 (2020).

4. Ozel F. Earth-abundant quaternary semiconductor Cu_2MSnS_4 ($M = \text{Fe, Co, Ni, Mn}$) nanofibers: Fabrication, characterization and band gap arrangement, *J. Alloys Compd.* 657, 157 (2016).
5. Kapush O.A. et al. Raman study of colloidal $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ nanocrystals obtained by “green” synthesis modified by seed nanocrystals or extra cations in the solution. *Heliyon* 9 (2023) e16037.

UDC 538.9

PHYSICAL PROPERTIES, PHOTOCATALYTIC AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF DOPED ZNO NANOSTRUCTURES

V. A. Karpyna¹, L. A. Myroniuk¹, D. V. Myroniuk¹, O. I. Olifan¹, O. F. Kolomys²,
V. V. Strelchuk², K. S. Naumenko³, O. Yu. Povnitsa³, L. O. Artiukh³, I. Garmasheva³,
S. D. Zahorodnia³ and A. I. Ievtushenko¹

¹I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science, NAS of Ukraine, 3 Omeljana
Pritsaka str., Kyiv, 03142, Ukraine, v.karpyna@ipms.kyiv.ua

²V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 45 Nauky av., Kyiv, 03028,
Ukraine

³D. K. Zabolotny Institute of Microbiology and Virology, NAS of Ukraine, 154 Zabolotny str.,
03143, Kyiv, Ukraine

Nanostructured materials are prospective for various applications in many fields of electronics, medicine, and biology. No doubt, nanomaterials with small particle size, large specific surface energy, and high redox potential have been considered as effective photocatalysts to provide new solutions to the safe environment and public health. Widespread environmental pollution by organic substances, heavy metals, inorganic compounds, and many other complex compounds is a highly urgent problem for humanity, which requires the development of new effective methods for detecting and cleaning natural, waste, and drinking water resources from chemical and biological pollutants. Among the standard methods used for water purification/decontamination, such as membrane filtration, adsorption, and electrodialysis, photocatalysis is an environmentally friendly, simple technology that can decompose organic pollutants in wastewater into water, carbon dioxide, or other small molecules [1].

ZnO is a wide band gap semiconductor (band gap of about 3.37 eV) with a large exciton binding energy of 60 meV that can effectively generate electron-hole pairs by ultraviolet irradiation [2]. As an alternative to traditional TiO_2 -based photocatalysts, ZnO nanostructures doped by various elements are considered perspective photocatalysts due to their tremendous advantages such as high photosensitivity, high quantum efficiency, low cost, non-toxicity, and biocompatibility.

Our work presents a recent investigation of structure, morphology, optical properties, as well as photocatalysis and biological activity of ZnO nanostructures (NS) doped by Co and Mg. ZnO-doped NS with various Co and Mg impurity concentrations were grown on Si substrates by atmospheric pressure metal-organic chemical vapor deposition (APMOCVD) [3]. Powder mixtures of zinc acetylacetonate with magnesium/cobalt acetylacetonate in the amount of 5 wt. and 10 wt.% were used as precursors for grown Mg- and Co-doped ZnO nanostructures. The deposition process takes place in a quartz tube arranged in a tubular furnace with a temperature gradient of 300-500 °C between a boat with a source component and a substrate.

XRD patterns of all deposited ZnO samples confirm the formation of one wurtzite-type phase of ZnO. Intense XRD reflections were registered from planes (100), (002), (101) and (110). The absence of the secondary phase implies successfully incorporating Mg and Co into the ZnO cation sublattice. The SEM images indicate that Mg and Co-doped ZnO NS have a large surface area with nanosized 18-36 nm ZnO nanocrystals agglomerated in web-like or spherical-like geometry. Photoluminescence spectra reveal ultraviolet and visible emission bands, the intensity of which is

correlated with photocatalytic activity. A good photocatalytic result was obtained for ZnO NS doped by Mg (5 wt. %); at the same time, a significant diminishing of photocatalytic activity for Co-doped ZnO NS takes place.

The influence of magnesium and cobalt impurities on the cytotoxicity and virucidal activity of ZnO NS was also investigated. The antibacterial activity of Mg- and Co-doped ZnO NS against *E. coli* under dark conditions was investigated. Mg- and Co-doped zinc oxide coatings were toxic to Hep-2 cells in the undiluted state and non-toxic in dilutions, indicating a dose-dependent cytotoxic effect. All nanostructures, except ZnO-Mg (10 wt%), were not toxic to MDCK cells.

1. O.E. Baibara, M.V. Radchenko, V.A. Karpyna, A.I. Ievtushenko A Review of the Some Aspects for the Development of ZnO Based Photocatalysts for a Variety of Applications // *Physics and Chemistry of Solid State*. – 2021. – 22 (3). – P. 585-594. <https://doi.org/10.15330/pcss.22.3.585-594>

2. I. Shteplyuk, V. Khranovskyy, A. Ievtushenko, R. Yakimova Temperature-Dependent Photoluminescence of ZnO Thin Films Grown on Off-Axis SiC Substrates by APMOCVD // *Materials*. – 2021. – 14(4). – P. 1035 (15pp). <https://doi.org/10.3390/ma14041035>

3. A. Ievtushenko, V. Dzhagan, O. Khyzhun, O. Baibara, O. Bykov, M. Zahornyi, V. Yukhymchuk, M. Valakh, D. R. T. Zahn, K. Naumenko, P. Zaremba and S. Zagorodnya The effect of Ag doping on the structure, optical, and electronic properties of ZnO nanostructures deposited by atmospheric pressure MOCVD on Ag/Si substrates // *Semiconductor Science and Technology*. – 2023. – 38. – P. 075008 (14pp). <https://doi.org/10.1088/1361-6641/acd6b2>

УДК 621.396.22.029.7

ОСОБЛИВОСТІ ЗБУДЖЕННЯ ФОТОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ В ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКЛАХ ЛЕГОВАНИХ ІОНАМИ Er^{3+}

Н.А. Кевшин, А.А. Семенюк, А.Г. Кевшин

Волинський національний університет імені Лесі Українки
ponchuk.q@gmail.com, Semenyk_A@ukr.net, Kevsyin_A@ukr.net

Розвиток волоконно-оптичних ліній зв'язку та лазерної техніки стимулює інтенсивні дослідження нових оптичних матеріалів, здатних ефективно працювати в інфрачервоному (ІЧ) діапазоні. Халькогенідні склоподібні напівпровідники (ХСН), активовані рідкоземельними елементами (РЗЕ), є одним із найперспективніших класів матеріалів для легування ербієм, оскільки структура скла підтримує ефективне внутрішньоцентрове випромінювання. Іони Er^{3+} в стеклах випромінюють світло на довжині хвилі 1,55 мкм, яка відповідає мінімальним втратам у волоконно-оптичних системах. Це робить такі матеріали ідеальними для використання у волоконно-оптичних підсилювачах [1].

Край поглинання халькогенідних стекол є відносно широким. Це означає, що збудження може відбуватися у широкому діапазоні довжин хвиль, що робить ХСН перспективними для використання в різних оптичних пристроях, таких як лазери або підсилювачі. Вважається, що фотолюмінесценція (ФЛ) в таких матеріалах може збуджуватися двома способами. Перший з них, названий умовно резонансним, полягає у перетворенні оптичного збудження РЗЕ у люмінесценцію через пряме перерозподілення енергії на внутрішніх 4f рівнях. При цьому ХСН є середовищем, в якому розміщені РЗЕ, які, як правило, збуджуються квантами світла, що відповідають видимій області спектру або ділянці, яка до неї примикає. Іони Er^{3+} мають багаторівневу структуру енергетичних рівнів 4f-оболонки. Оптичне збудження відбувається шляхом переходу електронів між цими рівнями, зокрема між рівнями, які лежать у видимій та інфрачервоній областях спектра. Найбільш важливими є переходи між рівнями $^4\text{I}_{13/2}$ і $^4\text{I}_{15/2}$, що відповідають випромінюванню в близькій інфрачервоній області (довжина хвилі 1.55 мкм), яке активно використовується в телекомунікаційних системах. ХСН мають кілька переваг

перед оксидними системами: вищий показник заломлення та нижчу фонову частоту (тобто меншу енергію фонованого розсіювання). Це дозволяє досягати більш високого квантового виходу люмінесценції, що робить їх перспективними для використання в оптичних і фотонних технологіях.

Другий спосіб збудження ФЛ в халькогенідних склоподібних напівпровідниках полягає у використанні енергії, що передається від збудженої матриці скла до іонів РЗЕ. У цьому випадку ХСН поглинає світло з енергією, яка приблизно відповідає оптичній ширині енергетичної щілини (E_g) скла. Оскільки халькогенідні стекла мають широку енергетичну щілину (E_g), її оптичні переходи можуть перекриватися з оптичними переходами іонів РЗЕ, що дозволяє передавати енергію від матриці до Er^{3+} , збуджуючи їх [2].

1. M. Kochanowicz, J. Zmojda, P. Miluski, A. Baranowska, K. Sadowska, M. Kuwik, J. Pisarska, W. A. Pisarski, and D. Dorosz. Ultra-broadband emission in $Er^{3+}/Tm^{3+}/Ho^{3+}$ triply-doped germanate glass and double-clad optical fiber. *Optical Materials Express*. 2022. Vol. 12, № 6. P. 2332–2342.

2. I.V. Kityk, V.V. Halyan, V.O. Yukhymchuk, V.V. Strelchuk, I.A. Ivashchenko, Ya. Zhydashchyy, A. Suchocki, I.D. Oleksyuk, A.H. Kevshyn, M. Piasecki. NIR and visible luminescence features of erbium doped $Ga_2S_3-La_2S_3$ glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2018. V. 498. P. 380–385.

УДК 539.21; 621.793

ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОЇ ДІЇ СІРКОВМІСНИХ РОЗЧИНІВ НА ВИСОКОЛЕГОВАНІ СТАЛІ І ПОКРИТТЯ НІТРИДУ ХРОМУ

Г.О. Князєва, С.А. Князєв, В.В. Субботіна, Д.О. Педченко

НТУ «ХПІ», м. Харків, вул. Багалия 21, obmeninfoserg@ukr.net

У сучасному світі одне з найпоширеніших питань є корозія матеріалу. Слід відмітити той факт, що коливання температури при нагріванні або маніпуляціях з металами при високих температурах, особливо при нагріванні та охолодженні, можуть збільшити швидкість окислення таких матеріалів як сталь, оскільки захисна оксидна плівка може тріскатися і, можливо, відшаровуватися внаслідок термічного навантаження. Через низьку термостійкість порушується збереження захисної плівки. Також потрібно брати до уваги, де саме буде працювати та чи інша деталь. Так, під час термічного крекінгу техногенних ресурсів, сплави страждають від хлор- і одночасної сірко-індукованої високотемпературної корозії. Більшість широко використовуваних високотемпературних сплавів протистоять високотемпературній корозії за рахунок утворення оксидних лусочок. У разі сплавів Fe-Cr-Ni цей захисний оксидний шар в основному являє собою Cr_2O_3 . Однак початковий оксидний шар сплавів часто руйнується в таких атмосферах, оскільки газ HCl або хлор здатні проникати в цей захисний шар і послідовно утворювати легкі хлориди металів з основним матеріалом. У результаті утворюється незахищена окалина [1, 2].

Тому використання «цільних» матеріалів не завжди виправдано і щоб дотримуватися критерію ціна/якість використовують різноманітні покриття. Такий метод дає змогу отримати чудовий захист від корозії, ерозії або може використовуватися як дифузійний бар'єр. Одним із основних методів нанесення покриттів проти високотемпературної корозії це фізичне осадження з парової фази (PVD). Цей метод передбачає отримання пари вихідних компонентів і її конденсацію або сублімацію на підкладці у вигляді тонкої плівки такого самого складу, що й вихідний матеріал. Властивість отримання «тонкоплівкових покриттів» (від декількох ангстрем до декількох мікрон) відрізняє цей метод від інших (CDV, VDS) [3].

В якості матеріалу дослідження була обрана сталь аустенітного класу 08X18H9T з покриттям CrN (рисунок 1) та без нього, та сталі феритного класу 12X17. Випробування проводились у агресивному середовищі ($\text{Na}_2\text{SO}_3 + 5\%\text{NaCl}$) при температурі 900°C , протягом 1 години 20 хвилин.



Рис. 1. Мікроструктура сталі аустенітного класу з покриттям CrN до випробувань

Після випробування, на сталі аустенітного класу (08X18H9T) без нітридного покриття (CrN) спостерігається міжкристалітна корозія та викрошування окремих зерен, що було очікувано (рисунок 2,б). Зразок з покриттям характеризується відсутністю захисного шару нітриду, але порівнюючи його з тією ж сталлю без захисного шару, то можемо побачити значно кращі результати (міжкристалітна корозія непомітна, а викрошування окремих зерен не відбувається) (рисунок 2,а).

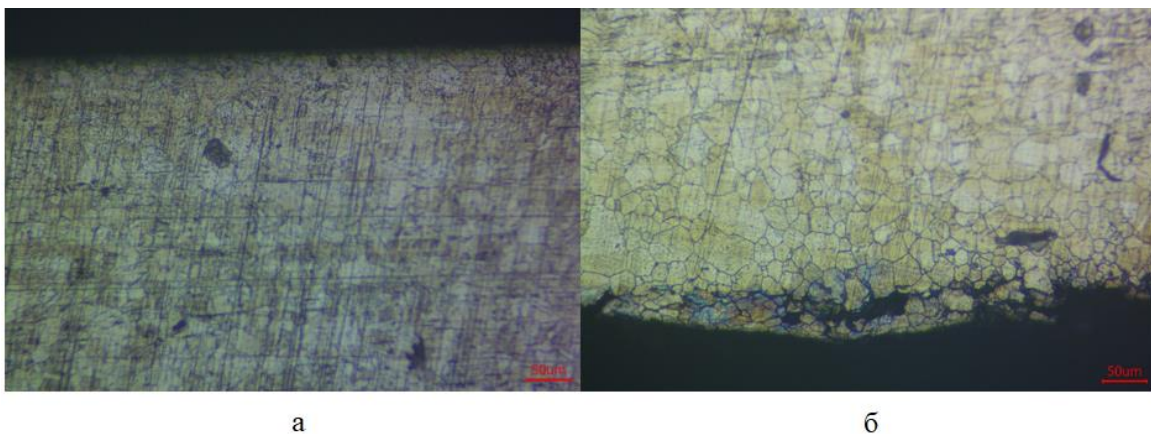


Рис. 2. Мікроструктура сталі аустенітного класу з покриттям CrN та без нього після печі (а – з покриттям $\times 200$, б – без покриття $\times 200$)

Зразок зі сталі феритного класу при високотемпературному дослідженні у висококорозійному середовищі проявили себе краще ніж зразки аустеніту без захисту, про що свідчить фото на рисунок 3.

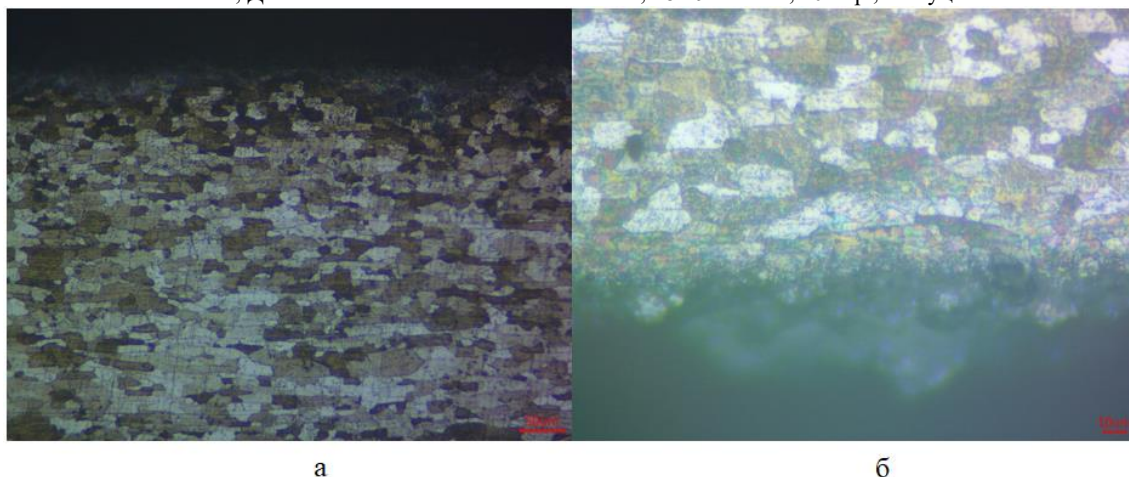


Рис. 3. Мікроструктура сталі феритного класу після печі (а – $\times 200$, б – $\times 500$)

Таким чином, при високих температурах перевагу має сталь феритного класу, а аустенітна може бути використана з покриттям CrN.

1. C. Schwalm, M. Schütze, The corrosion behavior of several heat resistant materials in air +2vol% Cl₂ at 300 to 800 °C Part I - Fe base and Fe containing alloys, Mater. Corros. 51 (2000) 34–49. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2021.109241>

2. Manuela Nimmervoll, Gregor Mori, Stefan Honig, Roland Haubner, High-temperature corrosion of austenitic alloys in HCl and H₂S containing atmospheres under reducing conditions, doi:10.1016/j.corsci.2022.110214.

3. Giovany Biava, Irene Bida de Araujo Fernandes Siqueira, Rodolpho Fernando Vaz, Gelson Biscaia de Souza, Hermano Cezar Medaber Jambo, Alberto Szogyenyi, Anderson G.M. Pukasiewicz, Evaluation of high temperature corrosion resistance of CrN, AlCrN, and TiAlN arc evaporation PVD coatings deposited on Waspaloy, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2022.128398>

PACS number: 61.82.Fk

FEATURES OF STRUCTURAL INHOMOGENEITIES IN CADMIUM ANTIMONIDE MONOCRYSTALS

**Yu.V. Koval, L.V. Yashchynskyy, S.A. Fedosov, D.A. Zakharchuk,
L.I. Panasyuk, A.V. Skvortsova, I.O. Hutsol**

*Lutsk National Technical University, 75 Lvivska St., Lutsk 43018, Ukraine
y.koval@lntu.edu.ua*

It is known that monocrystals grown by Czochralski or zone melting, with the so-called layered structure (layers or bands of growth). Layered structure is a periodic change in the concentration of impurities and defects along the growth axis of the crystal. This leads to periodic changes in resistivity and other parameters of the crystals affects the characteristics of the devices yield of integrated circuits, characteristics of position-sensitive detectors and detectors of long-range particles for which the maximum geometric size is chosen along the growth axis [1]. Please note that during the layered inhomogeneity is different in the range of tens of microns to millimeters and growing proportion of temperature gradient in the crystallization front.

In this work a study to identify structural inhomogeneities in CdSb monocrystals doped with Te. The method of optical topography revealed layered structure of the investigated single crystals with a period of about 300 microns (Fig. 1).

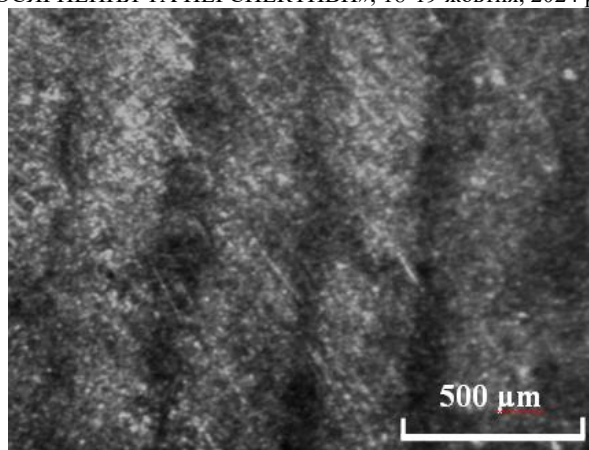


Figure. 1. Longitudinal section topographs CdSb monocystal doped with Te

It is believed that the impurity band formed as a result of temperature fluctuations during crystal growth arising from rotation or as a result of convection currents in the melt. This leads to fluctuations in growth rate, which cause inhomogeneous distribution of impurities, for which the coefficient is different from the segregation unit. The formation of bands of high and low concentration of impurities due to the dependence of this ratio on growth rate and speed of rotation of the crystal. There is another point of view according to which the layered structure is the result of convection currents caused by temperature gradients. As a result of concentration overcooling crescent front quickly moves forward to the disappearance of unstable temperature gradient when the growth rate again takes a normal value. Through periodic repetition of the process of change in the crystal growth rate formed transverse layers with different content of impurities [2].

Analysis of various methods used to study inhomogeneities in semiconductors showed that in the case of semiconductors manyvalley required quantity control requirements can satisfy two-probe compensation method with the greatest possible resolution. Accuracy two-probe compensation method was practically dependent on the resistivity of the material, since the current through the measuring probes with full compensation does not go away and they are vital.

Samples CdSb(Te) for research two-probe compensation method were cut parallel and perpendicular to the axis of crystal growth. After the sample was passed a constant stabilized current, which can be changed, both in magnitude and direction. Voltage drop between probes measured compensation method using the potentiometric setup. Measurement of resistivity was carried out along the length of the sample with a resolution of 0,5 mm. The results of measurements are constructed experimental curves of the resistivity distribution along the length of the samples. In dependence $\Delta\rho/\rho_c = f(X)$ found a much higher resistivity deviation from the mean ρ_c in samples cut along the axis of the crystal growth than in samples cut perpendicular to this axis. Abrupt changes in gradient resistivity $\Delta\rho$ in the direction of crystal growth due to the existence in this area of significant gradients of concentration of charge carriers Δn . Therefore, we can speak about the presence of crystal growth direction impurity concentration heterogeneities, with a frequency necessary to note in its distribution along the length of the samples.

When comparing the results obtained by optical topography and two-probe compensation method, suggested that the crystals is shown layered structure with several types of layers are characterized by different periods. To test this assumption a study of structure by means of scanning electron microscope (SEM). During these studies revealed layered structure of the investigated single crystals with the period of the order of 1,5 microns. Along with those using EDX-analysis has assessed the distribution of chemical elements in the bulk monocystal. In the obtained dependences (Fig. 2) also observed inhomogeneous distribution of Te impurity concentration along the length of the samples.

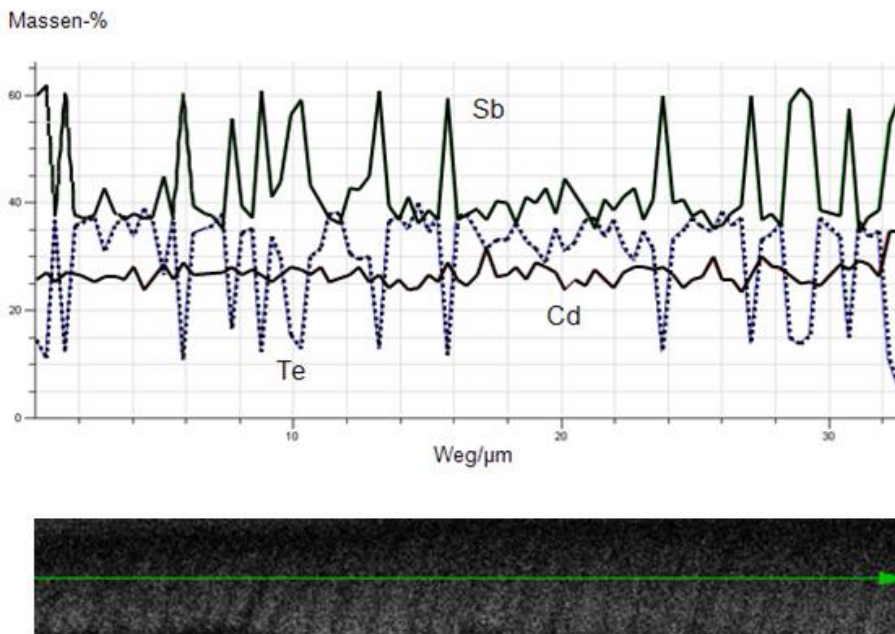


Figure. 2. The distribution of chemical elements along the length of samples CdSb(Te)

From the above results of studies suggest that in CdSb monocrystals doped layers are inhomogeneous distribution of impurities with different periods, and it must be considered when studying the anisotropy of physical properties data of monocrystals.

1. Rave K. Defects and impurities in semiconductor silicon / Rave K., trans. from English. – Springer–Verlag, 1984. – 475 p.

2. Baranskiy P. I. Neodnorodnosti napivprovidnikov i aktualni zadachi mizhdefektnoi vzaemodii v radiatsiyniy fizitsi nanotehnologiy / P. I. Baranskiy, A. V. Fedosov, G. P. Gaidar. – Luck : Nadstyr'ya, 2007. – 323 p.

PACS 78.15.+e

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ РІПАКОВОЇ ОЛІЇ, ОТРИМАНОЇ З НАСІННЯ, ОЧИЩЕНОГО ЕЛЕКТРОСТАТИЧНИМ ПОЛЕМ

С.Й. Ковалишин¹, С.В. Мягkota¹, Р.С. Шевчук¹, О.М. Сукач¹,
А. Дідух¹, А.С. Пушак^{2,3}, О.П. Кушнір¹, В.В. Пташник¹

¹Львівський національний університет природокористування

²Українська академія друкарства,

³Львівський торговельно-економічний університет

smyagkota@gmail.com

Олії рослинного походження містять ряд поліненасичених жирних кислот (ліноленова, лінолева, олеїнової) вітамін Е (токоферол) провітамін А (каротин) [1, 2, 3], які відграють важливу роль у харчуванні людини.

В даній роботі досліджено зразки ріпакової олії, отриманої методом холодного пресування з насіння, яке проходило додаткову очистку електростатичним полем з напруженістю $E = (0,5-2,5)$ кВ/см протягом часу $t = 3-30$ с. Як репер, реєстрували також

спектрально-люмінесцентні характеристики зразків ріпакової олії, приготовленої аналогічно, з контрольного насіння ріпаку, яке не проходило обробку електростатичним полем.

Давачем інформації про хімічний склад та структуру клітини досліджуваного насіння була поведінка флуорофорів (люмінесцентно активних складових) ріпакової олії, а саме, токоферолу, фенолу, жирних кислот, вітамінів та пігментів, що входять до її складу.

Встановлено, що люмінесцентно активні складові ріпакової олії, приготовленої з насіння, яке проходило очистку електростатичним полем з напруженістю $E = (0,5-2,5)$ кВ/см протягом часу $t = 3-30$ с характеризуються ідентичними спектрально-люмінесцентними властивостями з такими, характерними для ріпакової олії, приготовленої з насіння, яке не проходило додаткову обробку електростатичним полем. А саме, спектрально-люмінесцентні властивості флуорофорів ріпакової олії (токоферолу, фенолу, жирних кислот, окисних продуктів, вітамінів та пігментів), приготовленої з насіння, яке проходило обробку електростатичним полем з напруженістю $E = (0,5-2,5)$ кВ/см протягом часу $t = 3-30$ с були ідентичними з такими, характерними для флуорофорів ріпакової олії, приготовленої з ріпакового насіння, яке не оброблялось електричним полем вказаних параметрів.

Отримані результати досліджень засвідчують, що проведення додаткової очистки насіння ріпаку у вказаному режимі не викликає змін у хімічному складі і структурі клітини, її жирно-кислотному складі та вмісту вітамінів і пігментів.

1. Мягkota С.В., Сукач О.М., Пушак А.С., Малий Т.С., Волошиновський А.С., Фультес М.М., Шевчук Р.С. Дослідження лляної олії з використанням методів оптичної спектроскопії. Стан і перспективи харчової науки та промисловості: Матеріали міжнародної науково-технічної конференції. Тези доповідей (м. Тернопіль 10 – 11 жовтня 2019 р.) ТНТУ імені Івана Пулюя. Тернопіль: вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2019 С. 53 – 54.

2. S. Myagkota, R Shevchuk, O. Sukach, T. Malyi, M. Fulmes Spectral and Luminescence Properties of Linseed Oils of Different Prehistory J. Of Fluorescence, 2022, 32 (6), P. 1991-1998.

3. Мягkota С.В., Шевчук Р.С., Сукач О.М., Мединський В.Є, Фультес М.М., Пушак А.С., Малий Т.С. Часова поведінка лляних олій отриманих методом холодного пресування. Матеріали V міжнародної наукової конференції присвяченої 380-річчю з дня народження Ісаака Ньютона (Луцьк – Світязь, 01–05 червня 2023 року). Актуальні проблеми фундаментальних наук. Луцьк Вежа-друк – 2023. С 70-72.

УДК 621.315.592

ТЕНЗОРЕЗИСТИВНИЙ ЕФЕКТ В СИЛЬНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛАХ Р-КРЕМНІЮ

А. Ковальчук, Л.І. Панасюк

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська 75, м. Луцьк, leonid9030@gmail.com*

Закономірності тензорезистивних ефектів (ТРЕ) у кристалах р-Ge і р-Si тісно пов'язані з енергетичними спектрами цих кристалів та їх перебудовою при одновісній деформації.

При одновісному тиску, як показують результати теоретичних досліджень зонної структури кремнію і германію р-типу [1] (рис. 1а), відбувається розщеплення вироджених при $X=0$ зон легких та важких дірок. В одновісно-деформованих кристалах при умові $X/[001]$ та $X/[111]$ їх ізоенергетичні поверхні близькі до еліпсоїдів обертання, осі яких збігаються з віссю деформації. Причому в зоні важких дірок формується сплюснутий, а в зоні легких витягнутий вздовж осі деформації еліпсоїди (рис. 1б).

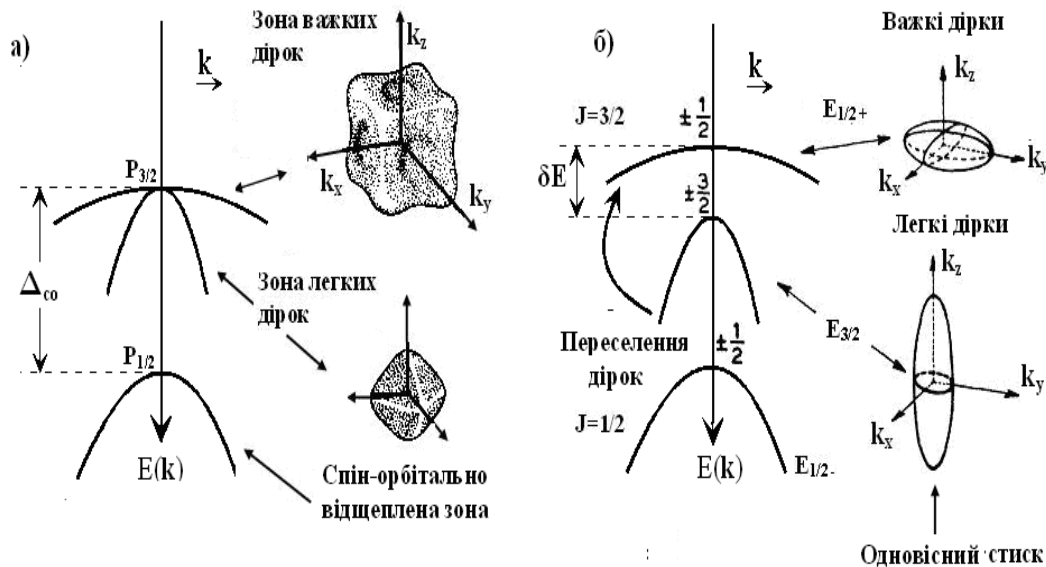


Рис. 1. а) Валентна зона та гофровані поверхні постійної енергії зон важких та легких дірок в $\mathbf{k}$ просторі недеформованого германію та кремнію. $P_{1/2}$ спин-орбітально відщеплена зона;

б) розщеплення валентної зони під дією одновісного тиску $\mathbf{X} // [001]$. Енергетичні поверхні поблизу $\mathbf{k}=0$ сплюснутий (зона важких дірок) та витягнутий (зона легких дірок) вздовж осі деформації еліпсоїди.

Проведені експериментальні дослідження поздовжнього тензорезистивного ефекту для головних кристалографічних орієнтацій при $T=4,2\text{K}$ у сильно легованих кристалах p-Si з концентрацією домішки бору $N_B=3,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. На відміну від аналогічних залежностей слабо легованих кристалів, спостерігається значне зростання питомого опору, а потім його зменшення при збільшенні одновісного тиску.

Немонотонні залежності TPE та їх анізотропія визначаються змінами ефективних мас „важких” дірок з тиском, обумовленими відповідними закономірностями перебудови енергетичного спектру валентної зони за рахунок зняття виродження зон „важких” і „легких” дірок при одновісній деформації.

Встановлено, що характер залежностей $\lg(\rho_x/\rho_0) = f(X)$ для орієнтації $\mathbf{X} // [111] // \mathbf{J}$ в області збільшення опору одновісно-деформованих кристалів з концентраціями домішки, меншими за критичну концентрацію переходу метал - ізолятор, визначається лінійним зростанням логарифму питомого опору, в той час як відповідні залежності для орієнтацій $\mathbf{X} // [001] // \mathbf{J}$ і $\mathbf{X} // [110] // \mathbf{J}$ мають в області зростання перегин (криві 2, 3, рис.2).

Оскільки лінійне зростання логарифму опору в області активаційної провідності обумовлене експоненціальним зменшенням концентрації вільних носіїв заряду (дірок) за рахунок лінійного збільшення енергії активації з тиском, деформаційно-індукована перебудова валентної зони має супроводжуватися близьким до лінійного зростанням в області малих тисків ефективної маси дірок у таких кристалах.

Підтвердженням цього служать залежності поздовжнього TP ефекту для вироджених кристалів p-Si(B) ($N_B= 1,0 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$). Зростання питомого опору p-Si(B) із збільшенням одновісного тиску, що безпосередньо визначається збільшенням ефективної маси дірок, має лінійну ділянку зростання $\rho_x/\rho_0 = f(X)$ в області малих тисків до 0,6 ГПа (вставка до рис. 2).

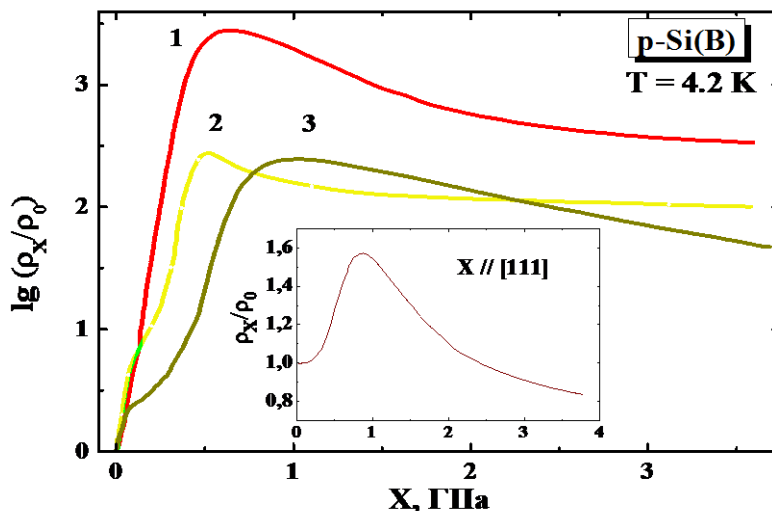


Рис.2. Залежності питомого опору сильно легованого p-Si(B) від одновісного тиску для орієнтацій: 1 – $X // [111]$; 2 – $X // [001]$; 3 – $X // [110]$. На вставці залежність $\rho_x/\rho_0 = f(X)$, одержана для виродженого p-Si(B) ($N_B = 1,0 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$)

Таким чином, аналіз даних ТРЕ в сильно легованих кристалах p-Si(B) з концентраціями домішки $N_B < N_C$, дозволив визначити орієнтацію тензочутливого елемента ($X // [111] // J$) і концентрації домішок, що забезпечує можливість одержати високу чутливість механо-електричних перетворювачів для області криогенних температур.

1. G.L.Bir and G.E.Pikus, *Simetriya i Deformatsionnye Effecty v Polupro-odn.*, Izd. Nauka, Moscow 1971; English translation: *Symmetry and Strain-Induced effects in Semiconduct* John Wiley & Sons, New York. 1974.

УДК 332.3

ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКОЇ ЗЕМЛІ ПІСЛЯ ПАДІННЯ УДАРНОГО БЕЗПІЛОТНОГО ЛІТАЛЬНОГО АПАРАТУ

А.С. Коверя¹, А.С. Ковров¹, В.Я. Шемет², А.О. Овчаренко¹,
К.О. Черданцева¹, К.В. Кириченко¹

¹ НТУ «Дніпровська політехніка», 49005 м. Дніпро, пр. Дмитра Яворницького, 19
koverya.a.s@nmu.one

² Луцький національний технічний університет, 43018, м. Луцьк, Львівська, 75
v.shemet@lntu.edu.ua

Військові дії безпосередньо впливають на сільські господарства, спричиняючи руйнування інфраструктури, забруднення ґрунтів хімічними речовинами, втрату доступу до ресурсів, що є критичним для аграрного сектора. Як наслідок, це не лише впливає на економіку регіону, але й створює ризики для продовольчої стабільності на національному рівні.

Падіння ударних безпілотних літальних апаратів (БПЛА) на сільськогосподарські землі стає все більш актуальною проблемою, яка негативно впливає на якість ґрунтів і аграрну діяльність. Під час таких інцидентів виникають вибухи та забруднення ґрунтів важкими металами та іншими токсичними речовинами. Таке забруднення не тільки погіршує родючість земель, але й становить загрозу для здоров'я населення, яке споживає продукцію з цих територій. Окрім забруднення, падіння БПЛА може призвести до фізичного пошкодження

земельного покриття, що спричиняє ерозію ґрунтів та зниження біорізноманіття. Це ускладнює відновлення сільськогосподарських угідь та вимагає додаткових заходів для покращення їхнього стану, зокрема рекультивації та застосування екологічних технологій.

У роботі виконані дослідження хімічного складу ґрунтів після падіння ударного БПЛА. Проби відбиралися в епіцентрі вибуху і поряд з ним. Як еталон використовувалися дві проби, відібрані на відстані приблизно 20 метрів від воронки вибуху.

Елементний склад зразків визначали за допомогою неруйнівного рентгенофлуорисцентного аналізу з використання спектрометра ElvaX компанії "Elvatech" (Україна). Встановлення обмеження для елементів 12Mg до 92U. Детектор – SDD з завантаженням спектроскопічного визначення 520001/с. Роздільна здатність детектора (для $K\alpha Mn$) при множинному завантаженні не перевищує 149 еВ.

Інфрачервоні (ІЧ) спектри реєстрували на спектрофотометрі IRAffinity-1S (Японія) в діапазоні частот $400-4000\text{ см}^{-1}$ однопроменевим методом у відбитому світлі. Досліджуваний матеріал змішували в агатовій ступці з порошком KBr.

Як показали результати, найбільш помітна різниця у вмісті елементів для зразка (проба 1), що був відібраний у епіцентрі вибуху. Так, має місце підвищений вміст свинцю. Для зразків №2 і 3 також помітна присутність свинцю, однак не така суттєва, як у пробі 1. Для еталонних зразків свинець практично відсутній.

Також зразок 1 привертає до себе увагу підвищеним вмістом сірки та алюмінію, присутністю паладію і, майже у два рази більшим вмістом срібла. Більш того, у зразку 1 присутній іридій, талій, вісмут та селен, що відсутні у інших зразках або вказані як сліди. У деяких зразках, що піддалися впливу вибуху, присутній кадмій, який відсутній у еталонних пробах. Кадмій, як і свинець, часто присутній у військовій техніці. Для інших проб різниця знаходиться у незначних відхиленнях один від одного і спектри мають однаковий характер відображення піків.

На ІЧ-спектрах зразків № 1 і 2, порівняно з еталонними зразками, було зафіксовано зникнення коливань довжин хвиль при 1994 см^{-1} та 1925 см^{-1} , у зразку 1 (рисунки 1) – при 1925 см^{-1} , що може свідчити про деградацію ґрунту, в тому числі втрату органічних речовин, зміну хімічного складу або появу шкідливих речовин. Спільною рисою для зразків 1-3 є поява коливань при $1030-1037\text{ см}^{-1}$, характеристичних для $S=O$, що вказує на появу сульфуровмісних сполук у ґрунті. Наявність нових коливань у зразках 1-3 при $794, 690, 601, 462\text{ см}^{-1}$ у порівнянні з еталонним (рисунки 2) є характеристичними для коливань у структурах оксидів вісмуту, алюмінію, свинцю, в решітці кадмієвих сполук, (наприклад, сульфід кадмію), для селену та його сполук (зв'язки $Se=O$, $Se-O$ та H_2Se).

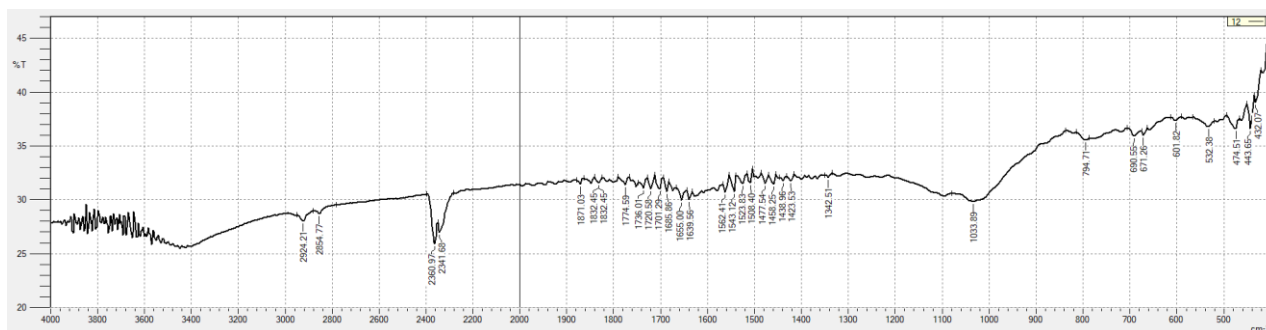


Рисунок 1. ІЧ-спектр зразка № 1

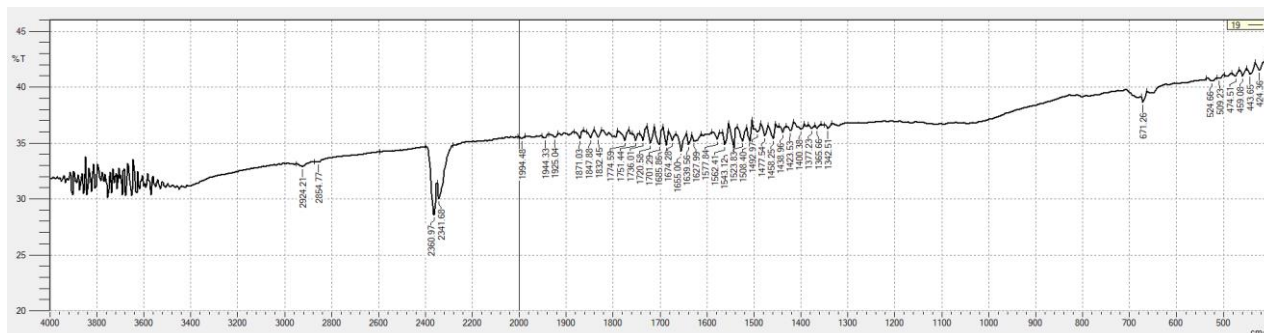


Рисунок 2. ІЧ-спектр еталонного зразка

Отже, результати дослідження підтверджують значний вплив вибуху від падіння БПЛА на склад ґрунту в зоні ураження. Найбільш виражені зміни спостерігаються у зразку 1, відібраному в епіцентрі вибуху, де виявлено підвищений вміст свинцю, сірки, алюмінію, паладію, срібла, а також наявність іридію, талію, вісмуту та селену, які відсутні або зустрічаються у незначних кількостях в інших зразках. Результати ІЧ спектроскопії свідчать про деструкцію органічних речовин і появу нових шкідливих сполук, таких як оксиди свинцю, кадмію та інші. Важливим наступним етапом досліджень є оцінка родючості ґрунтів та рослинного покриву аби з'ясувати рівень відновлювальної здатності і потенційну шкоду для сільськогосподарського виробництва.

УДК 546+544.6+621.355

СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ГІДРУВАННЯ КОМПОЗИТУ

$Tb_2Ni_{17-x}Mg/ Ca_{0.5}Dy_{0.5}MnO_3$

В.М. Кордан, В.Т. Волошин, Тарасюк І.І., В.В. Нитка, О.І. Заремба., В.В. Павлюк

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: vasyk.kordan@lnu.edu.ua*

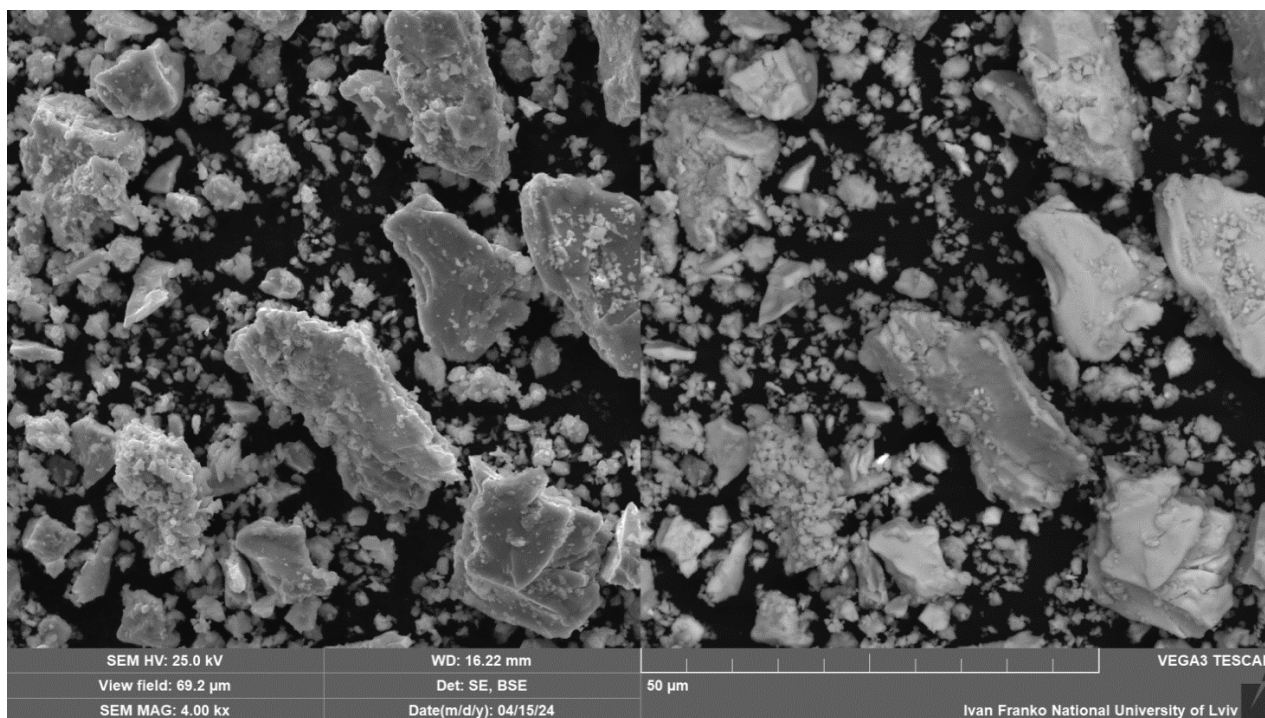
Композити на основі інтерметалідів є дуже цікавими для дослідників та розробників, адже вони здатні оборотно абсорбувати водень, тобто слугувати матеріалами для його накопичення. Завдяки здатності до багатоциклічної інтеркаляції-деінтеркаляції водню без руйнування вихідної структури такі матеріали широко застосовують у сфері матеріалознавства та енергетики. Інтерметаліди складу R_2Ni_{17} (R – рідкісноземельні метали) мають достатній міжатомний простір (октаедричні та тетраедричні пустоти) для включення атомів водню, тому вони можуть служити анодними матеріалами у металогідридних акумуляторах. Важливою характеристикою електродів є хімічна стійкість до дії лугів, адже корозія під дією електроліту на поверхні матеріалу згубно впливає на його електрохімічні властивості. Позитивний ефект на процеси гідрування також досягається після легування дрібнокристалічними порошками на основі перехідних металів, оксидів металів чи нітридів. Метою цієї роботи є синтез твердого розчину на основі інтерметаліду $Tb_2Ni_{16.5}Mg_{0.5}$ і оксидної кераміки складу $Ca_{0.5}Dy_{0.5}MnO_3$ та дослідження електрохімічних властивостей композиту на їхній основі.

Полікристалічний зразок складу $Tb_{10.5}Mg_{5.5}Ni_{84.0}$ (масою 1,5 г) синтезовано електродуговим сплавленням пресованої шихти чистих металів (усі чистотою вище, ніж 99,9 %, надлишок магнію 10 мас. %) в атмосфері очищеного аргону з подальшим гомогенізаційним відпалом за температури 400 °С впродовж 60 днів. Полікристалічний зразок $Ca_{0.5}Dy_{0.5}MnO_3$ синтезували за твердофазною реакцією, використовуючи оксиди та карбонати металів за температури 1000 °С упродовж 24 год з подальшим перетиранням і пресуванням. Спікання таблетки проводили за температури 1200 °С упродовж 8 год. Композит на основі

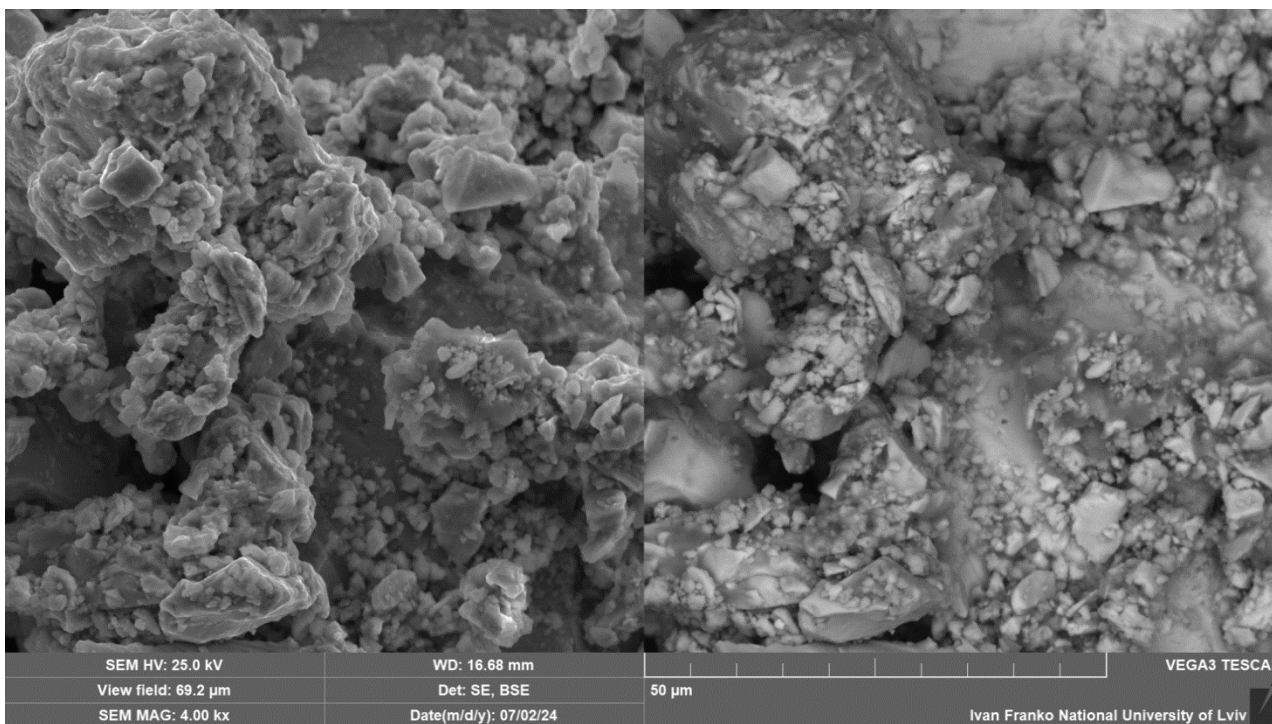
інтерметалічної фази $\text{Tb}_2\text{Ni}_{17}\text{:xMg}$ ($\text{Tb}_2\text{Ni}_{16,5}\text{Mg}_{0,5}$) з додаванням 5 мас. % керамічної фази ($\text{Ca}_{0,5}\text{Dy}_{0,5}\text{MnO}_3$) готували перетиранням суміші протягом 2 год в агатовій ступці до утворення гомогенного порошку.

Фазовий аналіз проведено за масивами порошкових даних, одержаних на дифрактометрі ДРОН 2.0М (Fe $\text{K}\alpha$ -випромінювання). Морфологію поверхні порошків вивчено методом скануючої електронної мікроскопії на електронному мікроскопі Tescan Vega3 LMU. Для визначення якісного і кількісного складу електродів використано метод енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (аналізатор Oxford Instruments). Електрохімічне гідрування сплавів виконано у 2-електродних прототипах хімічних джерел електричної енергії типу “Swagelok-cell”. Композит у подрібненому вигляді був змочений електролітом (6-молярний розчин KOH), спресований у тонкий пористий циліндр і виконував роль анода. Катодом слугувала дрібнодисперсна суміш $\text{Ni}(\text{OH})_2$ та графіту.

На рис. 1 зображено СЕМ-фотографії поверхні електродів на основі дослідженого композиту до та після гідрування. Електрохімічна поведінка електрода залежить від структурної особливості матриці матеріалу та стану поверхні зерен. Зерна інтерметалічної фази до гідрування є добре огранені та мають розмір 9-23 мкм, тоді як зерна оксидної кераміки є дрібнокристалічні та мають розмір 0,6-3,4 мкм (рис. 1, а). Після електрохімічного гідрування морфологія поверхні зерен інтерметаліду змінилася – грані стали більш округлені та протравлені, зерна утворили гранули з оксидною керамікою (рис. 1, б). Хімічний склад композиту під час електрохімічних процесів практично не змінився. Порівняно з електродом на основі інтерметалічного сплаву без додавання оксидної добавки ємність композитного електрода є більшою на ~10 % (2,24 Н/ф.о. та 2,46 Н/ф.о., відповідно). Такий позитивний вплив додавання кераміки на ємність матеріалу можна пояснити зменшенням протравлення поверхні зерен інтерметаліду та агломерацією частинок під дією електроліту.



a



б

Рис. 1. СЕМ-зображення електроду на основі композиту $Tb_2Ni_{17-x}Mg_x/Ca_{0.5}Dy_{0.5}MnO_3$ до (а) та після (б) 50-ти циклів гідрування-дегідрування (SE-детектор зліва та BSE-детектор справа)

Роботу виконано в рамках проєкту Національного фонду досліджень України (номер гранту 2022.01/0064).

УДК 548.1.02+548.31+621.355.8

ГІДРОГЕНСОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ $Y_2Ni_{17-x}Mg_x$ ТА ОКСИДНОЇ КЕРАМІКИ В.М. Кордан, Е.А Мацько., І.І. Тарасюк, О.І. Заремба, В.В. Павлюк

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: vasyk.kordan@lnu.edu.ua*

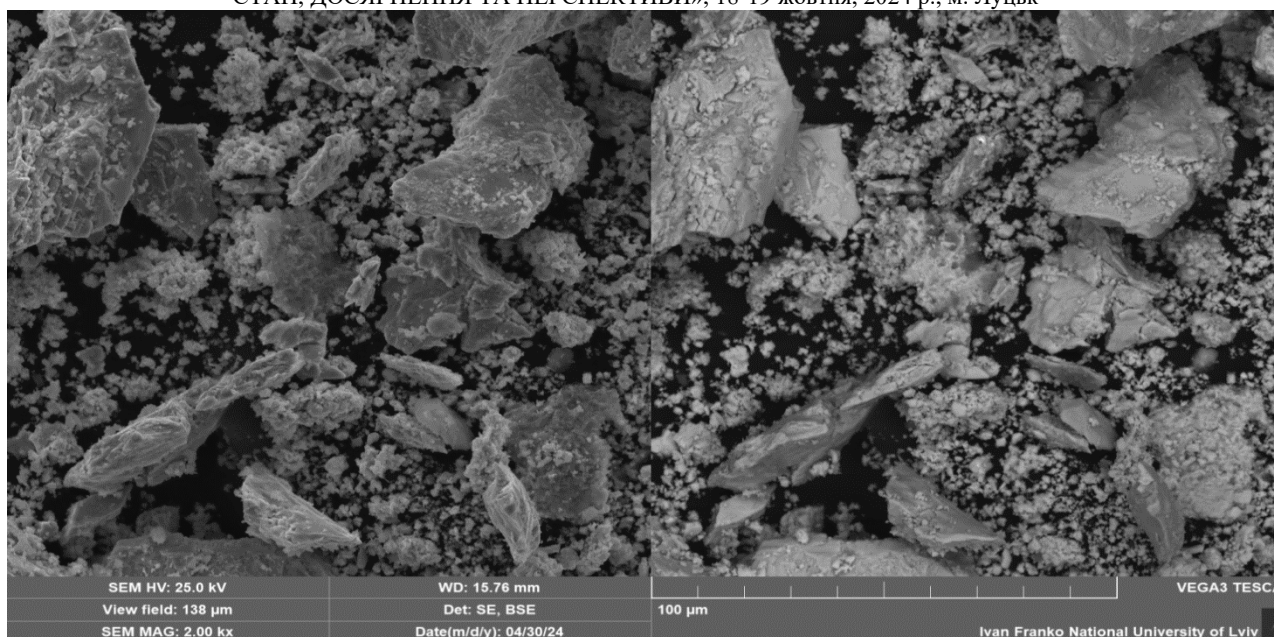
Пошук нових функціональних матеріалів для накопичення та перетворення енергії сьогодні є актуальним. Воднева енергетика викликає щораз більший інтерес, оскільки водень є екологічно чистим паливом. Гідрогенсорбційні матеріали виступають невід'ємним атрибутом цієї прогресивної галузі. У більшості випадків вони є складними композитами на основі багатокомпонентних сплавів. Збереження вихідної структури гідрогенсорбційної фази при оборотному процесі інтеркаляції-деінтеркаляції водню підвищує ресурс металогібридного акумулятора, а значна кількість абсорбованого водню – його ємність. Важливою характеристикою матеріалу є хімічна інертність щодо дії електроліту під час пропускання електричного струму (відсутність корозійних процесів на поверхні чи проходження побічних реакцій). Як електродні матеріали використовують корозійно стабільні сплави. На сьогодні досліджено велику кількість сполук та композитів, що мають здатність до сорбції водню, однак лише невелика частина має здатність до оборотного гідрування, що дає змогу використовувати такі матеріали багаторазово. Основними лімітуючими процесами є активація поверхні зерен

електродного матеріалу та дифузія гідрогену в об'ємі. Найбільш придатними для заповнення атомами гідрогену є пустоти в структурі гідрогенсорбційної фази, які частково чи повністю утворені атомами рідкісноземельних металів, оскільки з геометричної точки зору вони мають більший об'єм для включення атома малого розміру, а з хімічної – електронні хмари *d*- чи *f*-елементів сприяють утворенню гідридів. Метою цієї роботи є синтез металічного сплаву складу $Y_2Ni_{17-x}Mg_x$, $x = 0,5$, складного оксиду зі структурою ромбічного перовскіту складу $Ca_{1-y}Dy_yMnO_3$, $y = 0,5$ та дослідження гідрогенсорбційної здатності композиту на їхній основі.

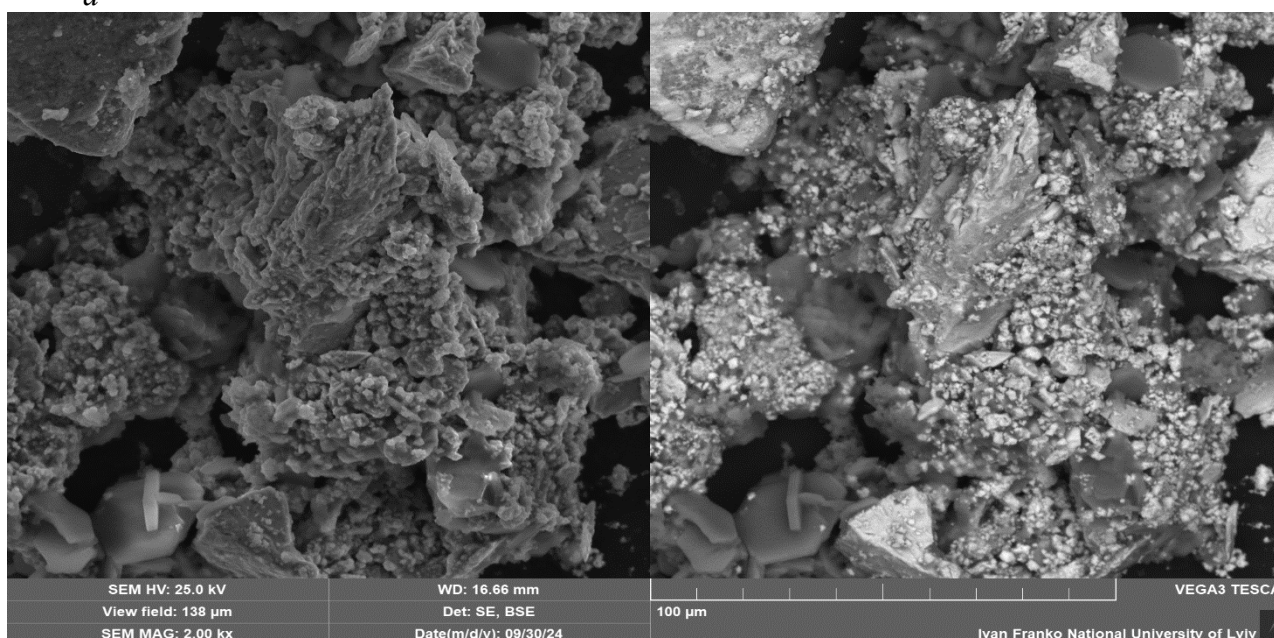
Полікристалічний зразок складу $Y_{10,5}Mg_{5,5}Ni_{84,0}$ (масою 1,5 г) синтезовано електродуговим сплавленням пресованої шихти чистих металів (усі чистотою вище, ніж 99,9 %, надлишок магнію 10 мас. %) з подальшим гомогенізаційним відпалом. Полікристалічний зразок оксидної кераміки складу $Ca_{0,5}Dy_{0,5}MnO_3$ (структурний тип $GdFeO_3$, просторова група *Pnma*) синтезували за твердофазною реакцією, використовуючи карбонати і оксиди металів. Композит на основі інтерметалічної фази $Y_2Ni_{17:x}Mg$ ($Y_2Ni_{16,5}Mg_{0,5}$, структурний тип Th_2Ni_{17} , просторова група $P6_3/mmc$) з додаванням 5 мас. % оксиду ($Ca_{0,5}Dy_{0,5}MnO_3$) приготували шляхом ретельного перетирання суміші протягом 2 год в агатовій ступці до утворення однорідного порошку.

Фазовий аналіз проведено за даними масиву, одержаного на порошковому дифрактометрі ДРОН 2.0М (Fe $K\alpha$ -випромінювання). Морфологію поверхні електродів вивчено методом скануючої електронної мікроскопії на електронному мікроскопі Tescan Vega3 LMU. Для визначення якісного і кількісного складу електродів використано метод енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (аналізатор Oxford Instruments з Si-дрейфуючим детектором X-Max^N20). Електрохімічне тестування сплавів (анодів) провели у 2-електродних прототипах хімічних джерел електричної енергії типу “Swagelok-cell”. Досліджуваний порошкоподібний композит попередньо спресували та змочили електролітом.

На рис. 1 зображено СЕМ-фотографії поверхні дослідженого композиту до та після електрохімічного гідрування. Зерна інтерметалічної фази до гідрування є добре ограничені, зерна керамічної фази утворюють дрібнодисперсні блоки неправильної форми (рис. 1, *а*). Після електрохімічного гідрування морфологія поверхні зерен інтерметаліду змінилася – грані стали більш округлені, поверхня стала більш розвинена; оксидна кераміка утворила агрегати на поверхні інтерметаліду (рис. 1, *б*). Електрод на основі інтерметалічного сплаву з додаванням керамічної фази демонструє на ~8 % кращу гідрогенсорбційну ємність (2,14 Н/ф.о. та 2,31 Н/ф.о., відповідно). Додавання кераміки зменшує хімічну взаємодію поверхні зерен твердого розчину на основі Y_2Ni_{17} з електролітом, що позитивно впливає на кількість абсорбованого гідрогену матеріалом.



a



б

Рис. 1. СЕМ-зображення електроду на основі композиту $\text{Y}_2\text{Ni}_{16,5}\text{Mg}_{0,5}/\text{Ca}_{0,5}\text{Dy}_{0,5}\text{MnO}_3$ до (а) та після (б) 50-ти циклів гідрування-дегідрування за збільшення 2000 разів (SE-детектор зліва та BSE-детектор справа)

Роботу виконано в рамках проєкту Національного фонду досліджень України (номер гранту 2022.01/0064).

УДК 544.02/548.3

КАТІОННЕ ТА АНІОННЕ ЗАМІЩЕННЯ У КРИСТАЛІЧНІЙ СТРУКТУРІ Pb_2GeS_4

А. Коржов, О. Смітюх, О. Марчук

Волинський національний університет імені Лесі Українки
кафедра неорганічної та фізичної хімії
вул. Банкова 9, м. Луцьк, e-mail: smitiukh.oleksandr@vnu.edu.ua

Pb_2GeS_4 утворюється у системі $\text{PbS} - \text{GeS}_2$, плавиться конгруентно з відкритим максимумом за температури 894 К [1]. Для цієї сполуки характерним є поліморфізм: Pb_2GeS_4 кристалізується в моноклінній (СП $mP28,14$; ПГ $P2_1/c$) або кубічній (СП $cI128,220$; ПГ $I-43d$) сингоніях. Наявність різних структурних форм відкриває можливості для отримання нових матеріалів, використовуючи різні технології синтезу.

Тернарний сульфід Pb_2GeS_4 є високоомним напівпровідником, що робить його перспективним для використання в електроніці та фотоніці. Він виявляє значну світлочутливість [2], що дозволяє використовувати його в сенсорних пристроях та інших оптоелектронних компонентах.

Зміни в структурі матеріалу, а отже створення умов для розширення можливостей його потенційного застосування, є можливим за рахунок часткового заміщення у аніонній підрешітці сульфуру (S) на селен (Se) з одночасним заміщенням у катіонній підрешітці свинцю (Pb (II)) на станум (Sn (II)). Це дозволяє отримувати високоентропійні матеріали із заданими фізичними параметрами.

У роботі представлено стартові результати вивчення впливу одночасного заміщення атомів металу та неметалу на основні параметри кристалічної структури Pb_2GeS_4 : період решітки, коефіцієнт дисторсії поліедрів, міжатомні віддалі.

Для аналізу використовували наступні склади: $\text{Pb}_{1.90}\text{Sn}_{0.10}\text{GeS}_{3.52}\text{Se}_{0.48}$, $\text{Pb}_{1.86}\text{Sn}_{0.14}\text{GeS}_{3.32}\text{Se}_{0.68}$, $\text{Pb}_{1.82}\text{Sn}_{0.18}\text{GeS}_{3.16}\text{Se}_{0.84}$, $\text{Pb}_{1.58}\text{Sn}_{0.42}\text{GeS}_{3.64}\text{Se}_{0.36}$. Збільшення вмісту атомів стануму (Sn) та селену (Se) в халькогенідах $\text{Pb}_{2-x}\text{Sn}_x\text{GeS}_{4-y}\text{Se}_y$ ($x = 0.10, 0.14, 0.18, 0.42$; $y = 0.48, 0.68, 0.84, 0.36$) має значний вплив на їх структурні характеристики (рис. 1) та (рис. 2).

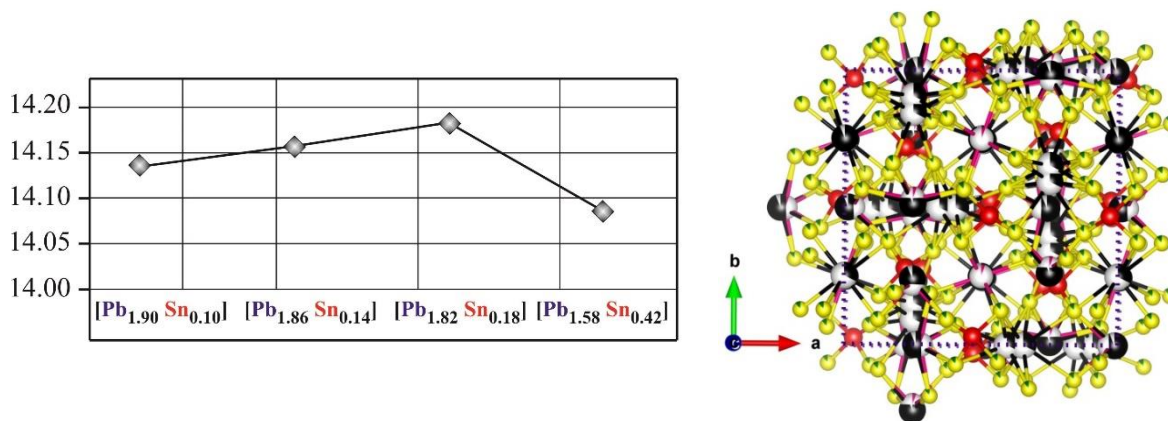
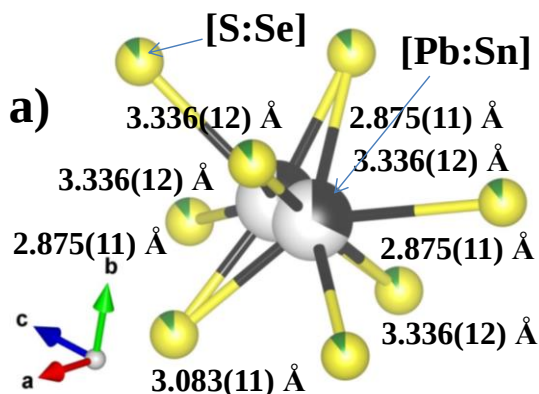
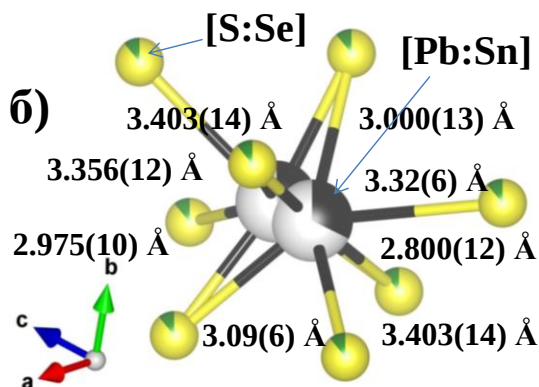


Рис. 1. Період a (Å) та розташування атомів у кристалічній решітці халькогенідів $\text{Pb}_{2-x}\text{Sn}_x\text{GeS}_{4-y}\text{Se}_y$

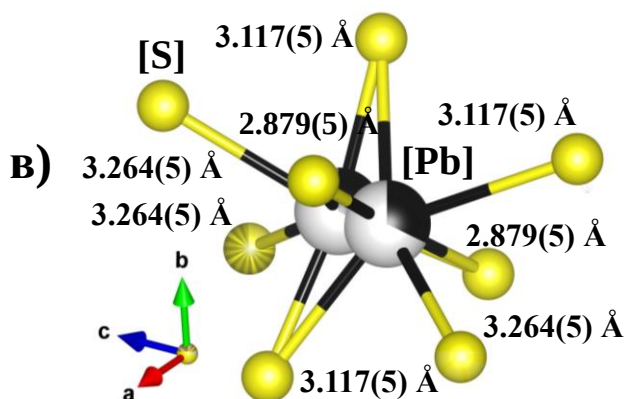
Аналіз структурних параметрів поліедрів $[\text{Pb}_{2-x}\text{Sn}_x 8(\text{S}:\text{Se})]$ дозволяє стверджувати, що коригуючи вміст атомів стануму та селену {одночасне катіонне (Pb(II) на Sn(II)) та аніонне (S на Se) заміщення} в халькогенідах $\text{Pb}_{2-x}\text{Sn}_x\text{GeS}_{4-y}\text{Se}_y$ можна отримувати матеріали із наперед заданими структурними параметрами, а отже прогнозувати фізичні властивості матеріалів на їх основі.



Середня міжатомна віддаль = 3.0979 Å
Об'єм поліедра = 34.3528 Å³
Індекс дисторсії (за віддалями) = 0.05131
Ефективне координаційне число = 5.0218



Середня міжатомна віддаль = 3.0822 Å
Об'єм поліедра = 35.3775 Å³
Індекс дисторсії (за віддалями) = 0.06073
Ефективне координаційне число = 5.3814



Середня міжатомна віддаль = 3.0867 Å
Об'єм поліедра = 34.4642 Å³
Індекс дисторсії (за віддалями) = 0.04487
Ефективне координаційне число = 5.2390

Рис. 2. Структурні параметри поліедрів [Pb_{1.90}Sn_{0.10} 8(S:Se)] (а), [Pb_{1.58}Sn_{0.42} 8(S:Se)] (б) та [Pb 8(S:Se)] (в)

Результати проведених досліджень можуть бути корисними для розробки нових сенсорних пристроїв, фотонних елементів та інших електронних компонентів, що потребують термодинамічно стабільних напівпровідникових матеріалів.

1. Susa K., Steinfink H. J. Solid State Chem. 1971, 3, 75-82.
2. Bletskan D.I., Terban V.P., Gurzan M.I., Potorii M.V., Inorg. Mater 1990. 26, 509-514.

PACS: 78.30.-j; 78.67.Bf; 61.46.Df; 63.22.-m

LASERS-INDUCED MODIFICATIONS OF THE MATERIALS PROPERTIES FOR APPLICATION IN MASKLES LITHOGRAPHY

A.A. Korchovi¹, K. Svezhentsova¹, A.A. Kryuchyn², I.V. Kosiak², V.V. Strelchuk¹,
S.A. Kostyukevich¹, M.S. Boltovets¹, O.M. Kolesnikov¹, V.M. Dzhagan¹

¹ V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 45
Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine

² Department of Optical Engineering, Institute for Information Recording of NAS of Ukraine, Shpak
Str. 2, Kiev 03113, Ukraine

For most areas of micro-, nano- and optoelectronics and sensors technology, there is a permanent search for new materials with better physical properties, as well as new technological solutions for their use. In particular, the use of traditional mask lithography technologies, on which today's industrial micro- and nanoelectronic productions are based, is not a sufficiently flexible method of creating device structures at the stage of their development and research, because even minor changes to the device architecture requires a completely new set of templates must be produced. That is why non-contact photolithography based on laser radiation and nanoprobe lithography is gaining more and more popularity in the research sector as a method of structuring materials and modifying their physical properties [1-3].

In this work we have studied the possibility to locally modify properties of the thin films of various inorganic materials (polycrystalline semiconductor, commercial photoresists, functional oxides) by commercially available UV laser engravers as a low-resolution prototype of maskless laser lithography. The effect of the laser treatment was studied by scanning probe techniques, vibrational Raman spectroscopy and photoluminescence with microscopic lateral resolution.

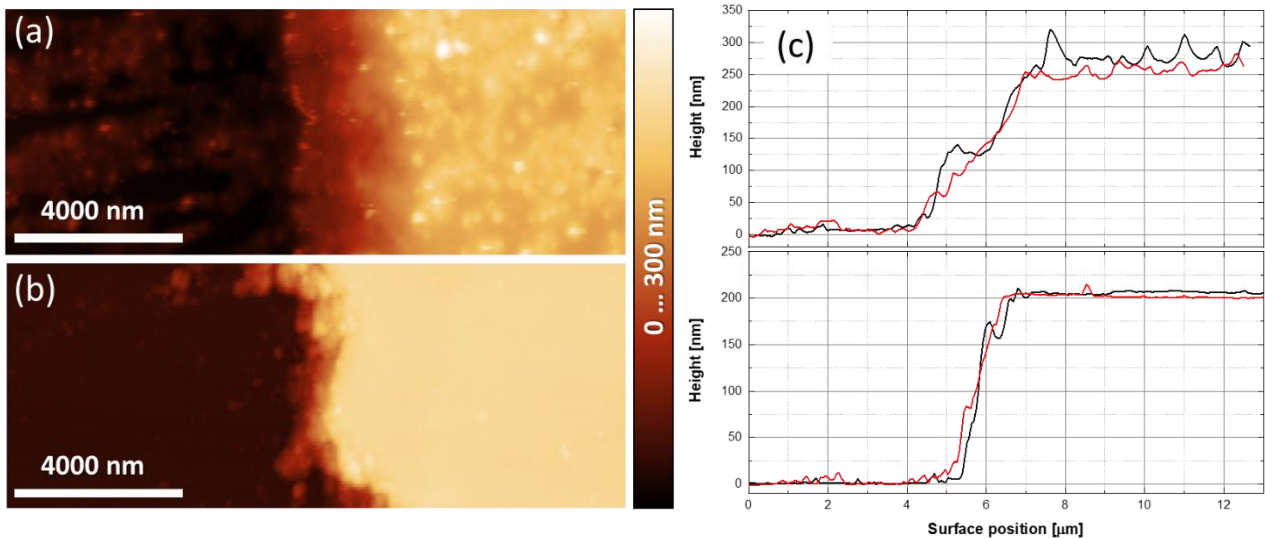


Fig.1. The AFM images of metal film step edges formed by mask (a) and mask-less laser (b) lithography. The sharpness of the steps is illustrated by the corresponding height profiles (c).

Recent advancements in laser technology have prompted a detailed analysis of the possibilities for increasing the resolution of laser engravers. To achieve higher precision, both the improvement of engraving algorithms and the refinement of the optical scheme were studied extensively. By carefully adjusting the geometry of the laser spot, optimizing the power supplied, and considering the ablation properties of the writing media, these factors have been successfully combined to enhance performance. As a result, the developed express, low-cost UV engraving technique enables the direct

production of patterns on thin metal films, functional oxides, and commercial resists with feature sizes ranging from 10 to 20 micrometers. This approach opens new avenues for fabricating intricate designs required in microelectronics. The cost-effectiveness of the method makes it accessible for various applications, including rapid prototyping and small-scale manufacturing. Moreover, the technique reduces production time significantly without compromising the quality of the engraved patterns.

In addition, the features of high-resolution mask-less laser lithography were compared to those of traditional mask-based optical lithography to assess their relative advantages. For this purpose, identical test patterns were produced using both a DIY laser writing system and masks created through electron lithography. It was observed that using laser-mask-less lithography significantly reduced edge effects, improving the fidelity of the produced patterns. By reducing the number of processing steps inherent in traditional methods, the laser-mask-less approach yields clearer, more uniform surfaces and achieves step edges as sharp as 1 micrometer (see Fig.1). This simplification not only enhances the quality of the final product but also increases throughput and reduces production costs. The comparison demonstrated that the mask-less method could achieve comparable, if not superior, results to conventional techniques. These findings suggest that mask-less laser lithography can be a viable alternative for applications requiring high-resolution patterning.

The work of KAA, SK, SVV, BMS, KOM, and DVM was supported by project #2023.05/0022, KAA, KIV was supported by project #2023.04/0004 funded by the National Research Foundation of Ukraine through a grant from the state budget.

1. Andreas Tsiamis; Yifan Li; Camelia Dunare; Jamie R. K. Marland, et al. Comparison of Conventional and Maskless Lithographic Techniques for More than Moore Post-Processing of Foundry CMOS Chips. Journal Of Microelectromechanical Systems (2020) 29 (5), 1245. <https://doi.org/10.1109/JMEMS.2020.30159648>.

2. Andriy A. Kryuchyn, Vyacheslav V. Petrov, Vasiliy M. Rubish, Mikhail L. Trunov, Petro M. Lytvyn, Sergiy A. Kostyukevich Formation of Nanoscale Structures on Chalcogenide Films. Phys. Stat. Sol. (b) 255, 2018, 1700405.

3. P.M. Lytvyn, S.V. Malyuta I.Z. Indutnyi, A.A. Efremov, O.V. Slobodyan, V.I. Min'ko, A.N. Nazarov, O.V. Borysov, I.V. Prokopenko. Features of mechanical scanning probe lithography on graphene oxide and As(Ge)Se chalcogenide resist. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics (2018) 21 (2) 52-159. <https://doi.org/10.15407/spqeo21.02.152>

УДК 620.91

ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФАЗИ $Y_{5-x}Sm_xGe_3$
А.М. Красіцька, З.М. Шпирка, Н.В. Герман, В.М. Кордан, В.В. Павлюк

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
кафедра неорганічної хімії,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 м. Львів, Україна
anna.krasitska@lnu.edu.ua*

У потрібних системах $R-R'-Ge$, де R та R' два різних РЗМ між ізоструктурними германідами зі структурою типу Mn_5Si_3 утворюються неперервні ряди твердих розчинів [1, 2]. Цей структурний тип характеризується великими октаедричними пустотами, утвореними шістьма атомами рідкісноземельного металу. Позиція $2b$ у структурі Mn_5Si_3 є вакантна та придатна для інтеркаляції літію.

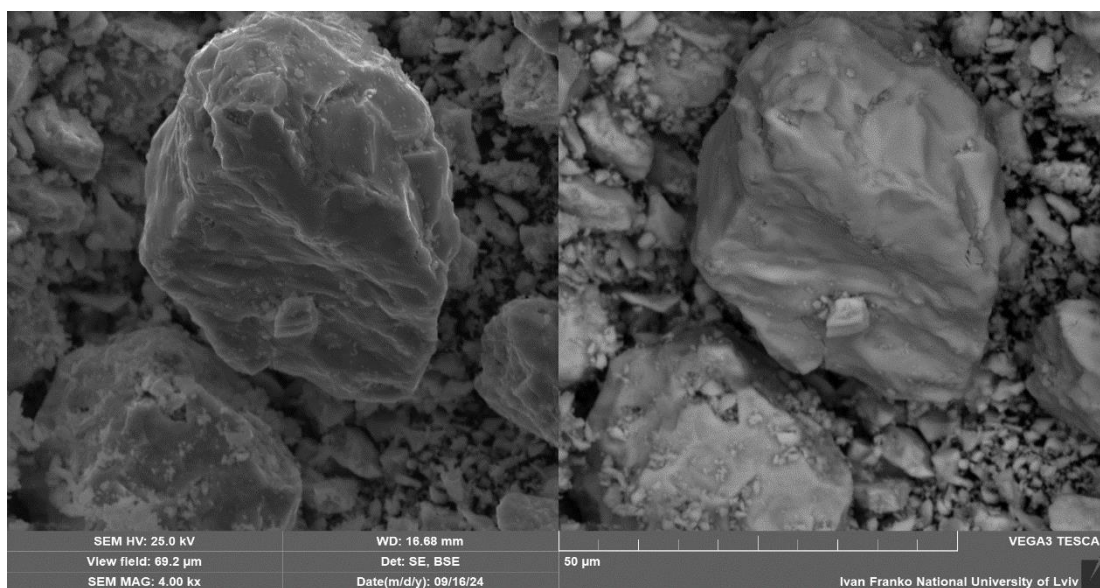
Мета і завдання дослідження – визначити механізм інтеркаляції літію в порожнечі фази $Y_{5-x}Sm_xGe_3$, провести фазовий аналіз зразка до та після літування, дослідити його якісний та кількісний склад.

Синтез зразків проводили електродуговим сплавлянням чистих металів, відпалювання – упродовж 720 годин за температури 600°C . Рентгенофазовий аналіз проводили за масивами порошкових даних, одержаних на дифрактометрі ДРОН-2.0М (Fe K α -випромінювання).

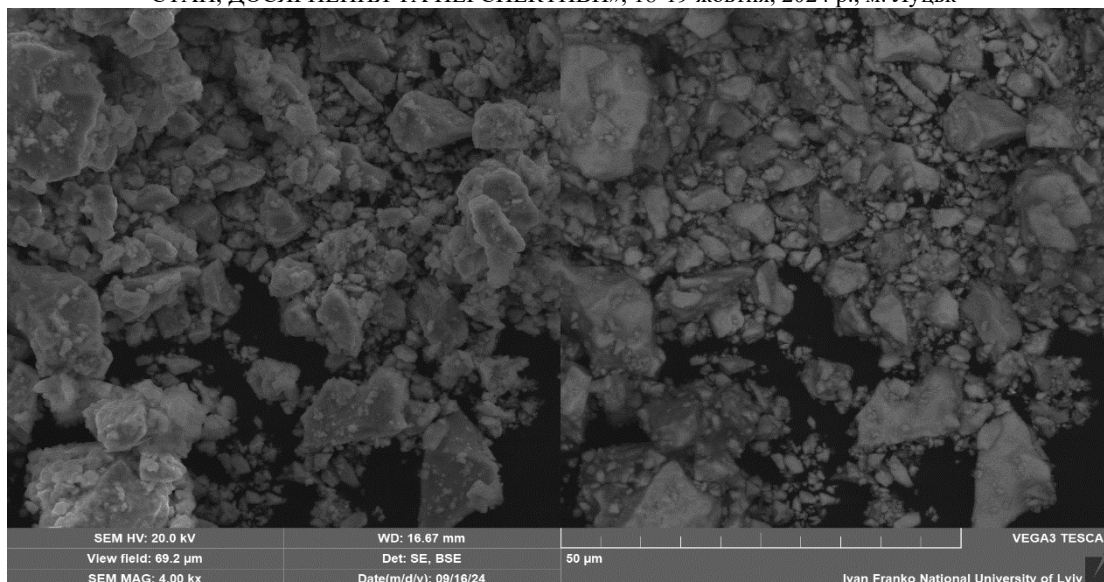
Електрохімічне літування/делітування досліджуваного електрода (сплав складу $Y_{40}Sm_{22,5}Ge_{37,5}$) проводили в двоелектродній моделі акумулятора “Swagelok-cell”. Як матеріал катода використовували порошок кераміки $LiCoO_2$. Матеріали анода і катода були розділені за допомогою пресованої целюлози як сепаратора. Як електроліт використовували 1 М розчин $Li[PF_6]$ у суміші апротонних органічних розчинників. Рентгенофазовий аналіз показав зміну параметрів (ізотропно зростають) елементарної комірки до та після літування: $a = 8,4586(1) \text{ \AA}$, $c = 6,3405(2) \text{ \AA}$, $V = 392,99 \text{ \AA}^3$, $a = 8,4690(6) \text{ \AA}$, $c = 6,351(1) \text{ \AA}$, $V = 395(1) \text{ \AA}^3$, відповідно.

Процес літій-інтеркаляції складається з двох етапів: перший – включення Li в октаедричні порожнечі в (2b) з утворенням $Li_xY_{3,6}Sm_{1,4}Ge_3$ і другий – часткове заміщення атомів Ge на Li з утворенням фази $Li_{x+y}Y_{3,6}Sm_{1,4}Ge_{3-y}$. Після введення Li в октаедричні порожнечі структура типу Mn_5Si_3 трансформується в тип Hf_5CuSn_3 . Морфологію поверхні досліджуваного електрода досліджували за допомогою скануючого електронного мікроскопа TESCAN Vega3 LMU. Кількісний склад порошків аналізували за допомогою енергодисперсійного рентгенівського аналізатора Oxford Instruments (система Aztec ONE). На рис. 1. показано СЕМ-зображення полікристалічного зразка $Y_{40}Sm_{22,5}Ge_{37,5}$ до та після літування за збільшення 4000 разів. Склад зерен після літування практично не змінювався. Кількість деінтеркальованого літію становить 0,22 Li/ф.о. Величина кількості електрохімічно активного літію добре корелює з результатами електрохімічного літування ізоструктурних Sn-вмісних фаз [3, 4].

Дрібні частинки розміром 2-7 мкм (рис. 1, б) електродів утворювали шляхом аморфізації більших зерен (15-30 мкм) (рис. 1, а). На основі цих частинок утворюються дрібні блокоподібні агрегати в результаті аморфізації матеріалу і взаємодії поверхні електрода з електролітом.



а



б

Рисунок 1. СЕМ-зображення поверхні зразка $Y_{3.6}Sm_{1.4}Ge_3$ до (а) та після літування (б) за збільшення 4000 разів

1. Bodak O. I., Shpyrka Z. M., Mokra I. R. Peculiarities of the interaction of the components in the system of two rare earth metals and germanium // J. Alloys Compd. 1997, No 247, 217-222.

2. Шпирка З. М. Фазові рівноваги, кристалічна структура і фізичні властивості сполук в потрійних системах $\{Y, La, Gd, Lu\}-Ce-Ge$ та $\{Y, Ce, Nd, Dy\}-Sc-Ge$ // Автореф. Дис. канд. хім. наук. Львів. 1990. 17 с.

3. Kowalczyk G., Kordan V., Stetskiv A., Pavlyuk V. Lithiation and magnesianation of R_5Sn_3 ($R = Y$ and Gd) alloys. Intermetallics. 2016, 70, 53–60.

4. Balińska A., Kordan V., Misztal R., Pavlyuk V. Electrochemical and thermal insertion of lithium and magnesium into Zr_5Sn_3 . J. Solid State Electrochem. 2015, 19(8), 2481–2490.

Роботу виконано в рамках проекту молодих вчених Міністерства освіти і науки України (номер державної реєстрації 0124U001013).

Автори Шпирка З. М., Кордан В. М. та Павлюк В. В. вдячні за часткову фінансову підтримку Фонду Саймонса (реєстраційний номер 1290588).

UDC 538.9; 532.6; 543.5

PREPARATION AND SORPTION PROPERTIES OF NANOPOROUS CARBON MATERIALS

S.A. Lisovska, T.O. Lysiv, N.Ya. Ivanichok, R.V. Ilnytskyi, A.M. Soltys, B.I. Rachiy

*Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57 Shevchenko St.,
Ivano-Frankivsk 76018 Ukraine. e-mail: bogdan.rachiy@pnu.edu.ua*

High-power electrochemical capacitors (EC) with a long cycling life are considered the most promising alternative to rechargeable batteries. However, the lower energy density of EC limits their wide application on an industrial scale. To build an EC with a high energy density, it is necessary to establish optimal conditions for the compatible functioning of an electrode material with a highly developed surface area and effective internal characteristics and an electrolyte with a wide operating voltage window. The optimal electrode material is composites based on nanoporous carbon material that work due to reversible adsorption/desorption of ions. High charge/discharge rates, long cycling life, and compatibility with various electrolyte systems, such as aqueous or organic electrolytes and ionic liquids characterize these materials. These materials are attracting increasing attention as core components for commercial supercapacitors [1]. Being the basis for the manufacture of EC electrodes operating on the charge/discharge principle of the electric double layer (EDL), the characteristics of the porous structure of nanoporous carbon materials affect the diffusion, transport, adsorption/desorption of ions and, thus, on the electrochemical characteristics of these devices [2]. Thus, it is especially important to investigate the relationship between the method of obtaining nanoporous carbon materials, the pore structure, and the electrochemical characteristics of these materials, as well as to deepen the understanding of the mechanism of transport of electrolyte ions in pores of different sizes. For this purpose, in this work, the method of obtaining nanoporous carbon material based on food industry waste with controlled sorption properties is described, and changes in the porous structure due to changes in the conditions of thermochemical activation are studied.

Preparation of nanoporous carbon materials (NCM) was carried out by the method of thermochemical activation. At the first stage, mechanically crushed walnut shells were poured into an autoclave and heated to 300-350 °C at a heating rate of 10 °C/min and held at this temperature for 30 min. The obtained carbonate was mechanically crushed to a fraction of 250 µm and mixed with water and potassium hydroxide in a weight ratio of 1:1:0.5. The resulting mixture was stirred for 30 minutes and dried in vacuum oven at a temperature of 70-80 °C for 48 hours [3]. After complete drying, the obtained material was poured into an autoclave, placed in a furnace and heated to 900 °C at a heating rate of 10 °C/min and held at this temperature for 30 min. Cooling was carried out with the furnace turned off. After complete cooling, the carbon material was washed with distilled water to neutral pH. In this way, we obtained thermochemically activated carbon material (L).

Nitrogen adsorption/desorption isotherms for evaluating the porous structure of the carbon material were obtained using a Quantachrome Autosorb Nova 2200e sorbto-meter at the boiling temperature of nitrogen (−196 °C). Before measurement, the studied carbon samples were kept at a temperature of 180 °C in a vacuum for 18 hours.

A typical isotherm of nitrogen sorption for the obtained carbon material is presented in Fig. 1. The obtained isotherm can be attributed to the II type according to the IUPAC classification. However, it should be noted that nitrogen absorption occurs at shallow pressures ($P/P_0 \rightarrow 0$). Sharp absorption at low pressures is explained by the strengthening of adsorbent-adsorbate interactions in narrow micropores (micropores of molecular size), which leads to the filling of micropores already at low pressure and is characteristic of nitrogen adsorption at -196 °C [4].

Isotherms of the second type, obtained for the material of the L series, are determined by the physical sorption of most gases on non-porous or macroporous adsorbents – the shape of isotherm results from unlimited monolayer-multilayer adsorption of nitrogen to high relative pressure. The absence of a clear inflection on the isotherm is a sign of a significant overlap of the single-layer

coating and the beginning of multilayer adsorption. In this case, the thickness of the adsorbed multilayer, as a rule, increases infinitely when $P/P_0 = 1$ [4].

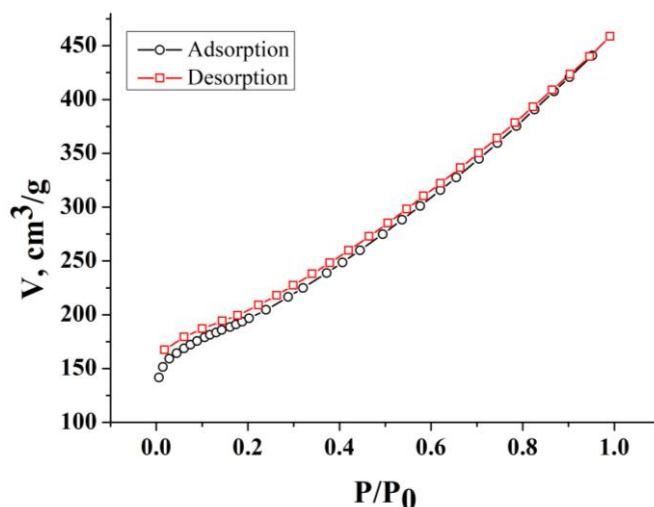


Fig. 1. Adsorption/desorption isotherm obtained for the material of the L series

The obtained isotherm for the L series material (Fig. 1) is characterized by the presence of hysteresis at low pressure, which is manifested in the discrepancy between the adsorption and desorption branches in the region of low relative pressures. The hysteresis loop can be attributed to the H3 type, according to the IUPAC classification [4], which is characteristic of micromesoporous carbons. There are several possible causes of low-pressure hysteresis: swelling of the spatial high-molecular carbon framework; irreversible retention of nitrogen molecules in the pores of the carbon material, the size of which is close to the size of nitrogen molecules; as well as the irreversible chemical interaction of the adsorbate (carbon material) with the adsorbent (nitrogen). The parameters of the porous structure of the obtained L-series carbon material are given in Table 1.

Table 1. Parameters of the porous structure of the L series sample

Sample	Specific surface area			Pore volume			$V_{\text{meso}}/V_{\Sigma}$, %	d, nm
	S_{BET} , m^2/g	S_{meso} , m^2/g	S_{micro} , m^2/g	V_{Σ} , cm^3/g	V_{micro} , cm^3/g	V_{meso} , cm^3/g		
L	707	528	179	0,709	0,081	0,628	88,6	4,016

Based on this, porous carbon materials were successfully synthesized by the method of thermochemical activation with a large number of mesopores. These materials are promising for the manufacture of electrodes of electrochemical capacitors.

1. K. Gong, et al. A flexible supercapacitor with high energy density and wide range of temperature tolerance using a high-concentration aqueous gel electrolyte. *Electr. Acta* (2024), V.475, 143585.
2. J.M. Rodríguez-Rego et al. Study of the influence of the type of pores present in the electrodes on the behaviour of a SWAGELOK-type supercapacitor. *J. of Energy Storage* (2023), V. 68, 107670.
3. S. Lisovska, et al. Structural and sorption properties of nanoporous carbon materials obtained from walnut shells. *Physics and Chemistry of Solid State* (2023), V.24(2), 348–353.
4. M. Thommes, et al. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry* (2015). V.87(9-10), 1051.

UDC 621.315.592

DEVELOPMENT OF RADIATION PROTECTIVE COATING BASED ON EPOXY COMPOSITE WITH IRON POWDER FILLER

S.V. Luniov¹, M.V. Khvyshchun¹, V.T. Maslyuk²

¹*Lutsk National Technical University Lvivska str., 75, Lutsk, Ukraine, 43018, luniovser@ukr.net*

²*Institute of Electron Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine Universitetska str.,
21, Uzhhorod, Ukraine, 88017, volodymyr.maslyuk@gmail.com*

The problem of protecting elements of electronic equipment and automation from aggressive radiation is relevant for atomic and nuclear energy, space, and scientific research [1]. It can be solved by developing different protective screens or coatings. Metal coatings and screens are expensive, massive, and non-technological, which creates several inconveniences, especially when protecting miniature electronic elements from radiation. In this regard, developing radiation-protective coatings that can be directly applied to the surface of such elements is promising. Epoxy composite coatings are relatively cheap, light, technological, corrosion-resistant, and adhesively strong, with low wear resistance. From our previous studies [2, 3], it was concluded that such coatings filled with iron and aluminum powders significantly increase the radiation resistance of single crystals of silicon and germanium. However, in these works, the dependence of the radiation resistance of these single crystals and, accordingly, the efficiency of the obtained epoxy coating on the content of the metal powder filler was not considered. This became the subject of research in this work.

Epoxy composite coating with a thickness of 5 mm, obtained based on ED-20 epoxy-diane resin with PEPA hardener without filler and with iron powder filler, was applied to a single crystal of germanium alloyed with an antimony admixture. A detailed description of the method of preparing germanium samples and epoxy composite coating is presented in works [2, 3]. At the same time, such coatings were obtained with the content of iron powder in its volume from 20 to 70%. Irradiation of germanium samples covered with a layer of epoxy composite was carried out at room temperature on an M-30 microtron with electrons with the energy of 19 MeV and flows $\Omega=2 \cdot 10^{13}$ el./cm² and $\Omega=6.9 \cdot 10^{14}$ el./cm². The effectiveness of the resulting radiation-protective coating was evaluated by the change in electrical properties of germanium single crystals. For this purpose, electrical conductivity and Hall Effect were measured for unirradiated and irradiated germanium samples covered with a layer of epoxy composite and without a layer of epoxy coating. When germanium single crystals were irradiated by the flows of $\Omega=2 \cdot 10^{13}$ el./cm² without an epoxy coating layer, a slight increase in their specific resistance was observed due to a decrease in the concentration and mobility of electrons. Applying an additional coating to germanium samples and increasing the filler content in it led to a reduction in resistivity and an increase in electron concentration and mobility. When the content of iron powder filler in the volume of the epoxy coating is more than 20%, the electrical parameters of the studied germanium samples were the same as for unirradiated single crystals. That is, such a layer of epoxy composite fully provides protection against electronic radiation with the energies $E \leq 19$ MeV and flows $\Omega \leq 2 \cdot 10^{13}$ el./cm². When germanium samples were irradiated by the flow of $\Omega=6.9 \cdot 10^{14}$ el./cm², an n-p conversion of their conductivity type occurred and a significant increase in their specific resistance due, first of all, to a decrease in the concentration of current carriers. This could indicate a significant concentration of the created radiation defects, which are compensating centers about impurity canters of antimony, with which germanium single crystals are doped, as well as the formation of large areas of disturbances (inclusions) in the volume of germanium during irradiation with p-type conductivity. As in the case of irradiation by the flow of $\Omega=2 \cdot 10^{13}$ el./cm², an additional layer of epoxy coating reduced the degree of defect formation in single crystals of germanium, which affected the reduction of specific resistance, the increase in the concentration and mobility of current carriers with an increase in the content of iron powder filler. However, the minimum value of the

specific resistance and the maximum value of the concentration of current carriers were obtained for germanium samples coated with a layer of epoxy coating with a filler of iron powder, the content of which is 50%. A further increase in the filler content led to an increase in the given electrical parameters of irradiated germanium single crystals covered with a layer of epoxy coating. Also, for germanium single crystals covered with a layer of epoxy resin with an iron powder content of more than 40%, a reverse p-n conversion of their conductivity type was observed, which may indicate a change in the defective structure of these single crystals. The protective epoxy composite layer reduces the electron energy and, accordingly, the concentration of the created defects, and their size (for inclusions). This may be the reason for the resulting reverse p-n conversion. The total energy loss of electrons when passing through the composite will depend on the molecular structure of the epoxy coating, the concentration of the filler, and the ratio between density, charge and mass number for each element that is part of the epoxy composite [4]. Therefore, this ratio for a layer of epoxy resin with a content of iron powder of 50% is the most optimal in terms of radiation protection.

The obtaining radiation protective coating based on ED-20 epoxy-dian resin with PEPA hardener and iron powder filler can be used to protect semiconductor electronics elements made of germanium and other semiconductors from high-energy electronic radiation. Such a coating is cheap, light, and technological in relation to metal protective coatings or screens.

1. Development of protective coatings based on epoxy composite materials for germanium single crystals from the influence of magnetic field and radiation. Yu. A. Udovyt'ska, S. V. Luniov, V. P. Kashytskyi, V. T. Maslyuk, I. G. Megela. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*. 2019. Vol. 16(4). P. 53–65.

2. Development of epoxy composite protective coatings for increasing the radiation stability of n-Ge single crystals. Y. A. Udovyt'ska, V. T. Maslyuk. *Functional Materials*. 2019. V. 27(1). P. 24–28.

3. Effect of Epoxy Composite Coatings on Radiation Stability and Magnetic Sensitivity of n-Si Single Crystals. Y. A. Udovyt'ska, S. V. Luniov, V.P. Kashytskyi [and others]. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*. 2021. V. 57(2). P. 222–227.

4. Evaluation of the shielding properties of the epoxy composite layer from the flow of electron irradiation / S.V. Luniov, M.V. Khvyshchun, A.I. Tsyz // *Actual problems of fundamental sciences: materials of the IV International. Science conference, June 1-5, 2021, Lutsk: Vezha-druk*, 2021. P. 124–127.

MECHANICAL PROCESSING TECHNOLOGY IN THE MANUFACTURE OF SILICON-BASED TEMPERATURE SENSORS

M.I. Mannanov

*Research Institute of semiconductor physics and microelectronics at the National University of
Uzbekistan. Tashkent, Uzbekistan
mannanov.2018@mail.ru*

In the creation of mechanical processing technology, which is used in the preparation of thermoresistors, the issue of obtaining semiconductor plates at the desired size, shape and profile responding to surface quality was initially solved. In this, the technological processes of cutting, polishing, bleaching and screwing Silicon slits into plates were carried out.

When dividing monocrystalline silicon slits into plates, the following methods were used: cutting with discs with an internal or external diamond powder composition; cutting with steel polotna or wire using an abrasive suspension; cutting with an ultrasonic method using abrasive; electro-erosion cutting; cutting using electronic or laser light.

Each method shown differed from one in efficiency, the depth of mechanical distortion of the surface, the extraction of material of useful thickness, the extraction of crystals of different shapes. When cutting slits, it turned out that the most convenient from the technological niche is internal diamond powder discs. The Diamond Edge was 1.5-2 mm thick, the disc thickness was 0.1-0.15 mm, the average size of the diamond particles was 20-40 μm . Diamond discs are machined with a small pull on the tin spindle, and in practice there will be no different vibrations when using. With it, slitka up to 150 mm in diameter can be cut into plates. The cutting of Silicon samples was carried out at a large rotational speed of 8000-12000 ayl/min . At such a circular rate, the linear speed of the disc reaches up to 30 M/s. In doing so, the optimum cutting speed was 10-50 mm/min, depending on the thickness of the plate. Cooling of the cutting area was carried out with cold water or using a special emulsion.

As a result of the correct selection of the cutting mode, it was achieved to cut the surface of the plate with a diameter of 76mm at the level of 7-8 classes. The difference in the thickness of the slitcut plates was ± 0.03 mm, the deviation and curvature of the surfaces from the parallel was not greater than ± 0.02 mm, respectively $\pm 15-25$ μm . The thickness of the cut plate became 2.5-3 times larger than the thickness of the disc. The relationship between the diameter and thickness of the cutting plate (250-300):1 turned out to be 40-45% of the slitka. A thin metal wire with an abrasive suspension was used to bring the silicon plates to a rectangular shape sample position. The Wire material was tungsten or MV-50 (50% Mo+50% W) alloy with a diameter of 0.1-0.15 mm. The relative pressure given to the wire was $9 \cdot 10^3$ N/m² from $7 \cdot 10^3$. The cutting speed was in the order of 10-15 mm/h. Wax, pitsein, paraffin, shellac or glyphthal tar were used to glue the plates.

1. Mannanov M.I. Electrophysicheskie svoystva kremnia, legirovannogo primesyu nikelia metodom diffuzii / / "Pribori" Mejdunarodnoe nauchno-technicheskoe obtshestvo priborostroiteley I metrologov. (Russia) №11 (269), 2022, P.37-43. [IF: 0.19]
2. Mannanov M.I. Issledovanie parametrov Silicon, legirovannogo nikel'em metodom diffuzii / / nanostructured semiconductor materials in Photoenergetics" III international scientific conference. Tashkent 2022, November 24-25. 344-345 PP.
3. Mannanov M.I. Thermoresistori na osnove monocystallicheskogo kremnia / / "II Mezhdunarodnaya nauchnaya conference" Sovremennye tendensii razvitiya physical poluprovodnikov: dostizheniya, problem I perspective " Tashkent 2022 g., December 27-28. c.99-100
4. M.K. Bakhodirkhanov, N.F. Zikrillayev, X.M. Iliev. Textbook "physics of semiconductors" - Tashkent: thinking, 2020. 480 b.

УДК 544.7

ДОСЛІДЖЕННЯ АДСОРБЦІЇ НУКЛЕЙНОВОЇ КИСЛОТИ ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ О.В. Маркітан

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Олега Мудрака, 17, Київ 03164
kammar@ukr.net*

Вуглецеві наноматеріали (нанотрубки) привертають дуже багато уваги дослідників, оскільки дають багато можливостей для застосування в різних галузях. Модифіковані вуглецеві матеріали завдяки їх хімічній стабільності, біофункціональності та біологічній сумісності є досить цікавими для біомедичного застосування. Функціоналізація нанорозмірних систем може призвести до створення матеріалів з високою спорідненістю до природних біологічних систем.

Протягом останніх років дезоксирибонуклеїнова кислота стала центральною молекулою в нанобіотехнології. Матеріали, які можуть адсорбувати ДНК, є цікавими для розробки біосенсорів, аналітичного розділення та генної інженерії.

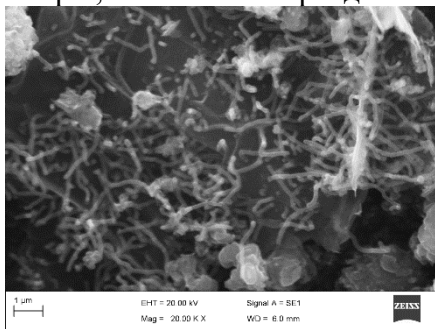


Рис.1. СЕМ-зображення вуглецевих нанотрубок, використаних у дослідженні.

Було досліджено адсорбцію нуклеїнової кислоти вуглецевими нанотрубками з водного розчину в залежності від часу при pH 4 та 7.4 (рис. 2).

Взаємодія розпочинається одразу після внесення вуглецевих нанотрубок у розчин ДНК. Адсорбційна рівновага досягається приблизно через 24 год. В ході дослідження відмічено залежність величини адсорбції від температури та pH розчину. В кислому середовищі при pH=4 величини адсорбції нижчі, ніж при pH=7.4. З пониженням температури при сталому значенні водневого показника розчину (pH=4) величини адсорбції зростають: при 23°C адсорбційна концентрація становить 6.8 мг/г, а при 18°C – 9.1 мг/г.

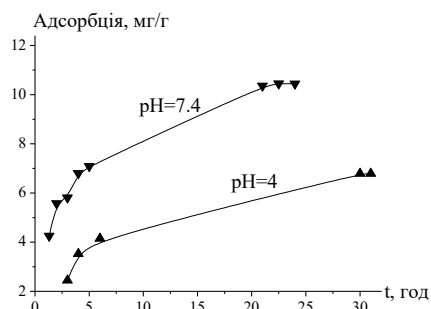


Рис.2. Залежність величини адсорбції ДНК від часу при pH 4 та 7.4.

Молекули дволанцюгової ДНК в розчині при pH>2 перебувають у вигляді аніонів. Карбоксильні групи нанотрубок теж дисоціюють в цій області, а тому їхні кінці є негативнозарядженими, що не сприяє адсорбції. Гетероциклічні основи нуклеотидів є недоступними для взаємодії, оскільки вони щільно упаковані всередині спіралі. Тому взаємодія можлива лише за участі вторинних фосфатних груп або гідрофільних залишків пентози, які локалізовані на поверхні молекули ДНК і контактують з молекулами води, в результаті утворення водневих зв'язків чи дисперсійної взаємодії.

PACS: 42.25.Bs; 81.05.Xj; 78.67.Bf

ADVANCED ABSORPTIVE FREQUENCY-SELECTIVE REFLECTION STRUCTURES FOR ELECTROMAGNETIC SHIELDING AND HIGH-FREQUENCY WAVE ABSORPTION

D. Maziar, O. Kolomys., V. Strelchuk, A. Nikolenko, M. Aliksandrov, Z. Tsybrii,
Ye. Melezhyk, P. Lytvyn

*V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41
Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine*

Absorptive Frequency-Selective Reflection Structures (AFSRS), which have been intensively studied in recent years, exhibit unique properties compared to traditional frequency-selective surfaces

(FSS). AFSRS have practical applications in stealth technology, electromagnetic shielding, and telecommunications by selectively absorbing electromagnetic waves to reduce interference and enhance signal performance. They are also used in antenna systems and sensor technology to improve signal reception and detection precision. Typically, AFSRS employ a bandpass FSS that dissipates the energy of external signals through elements loaded with lumped resistors, patterned resistive films, or magnetic lossy materials. Several AFSRS designs have been developed to transmit signals at lower frequencies while absorbing incident waves over a higher frequency band. Nowadays, artificial impedance surfaces or high-impedance surfaces are widely used to design electrically thin electromagnetic absorbers with improved absorption bandwidth [1].

In this work, we studied the possibility of achieving effective broadband AFSRS for high-frequency electromagnetic waves in the 8-15 GHz range. A specialized resistive paint was developed and tested on a set of meshes that form periodic resistive patterns (Fig. 1). An optimal combination of mesh geometry and resistive films produced by the paint has been developed to achieve broadband absorption in the level of -18 to -22 dB. The physical aspects of realizing efficient resistive screens and AFSRS will be discussed.

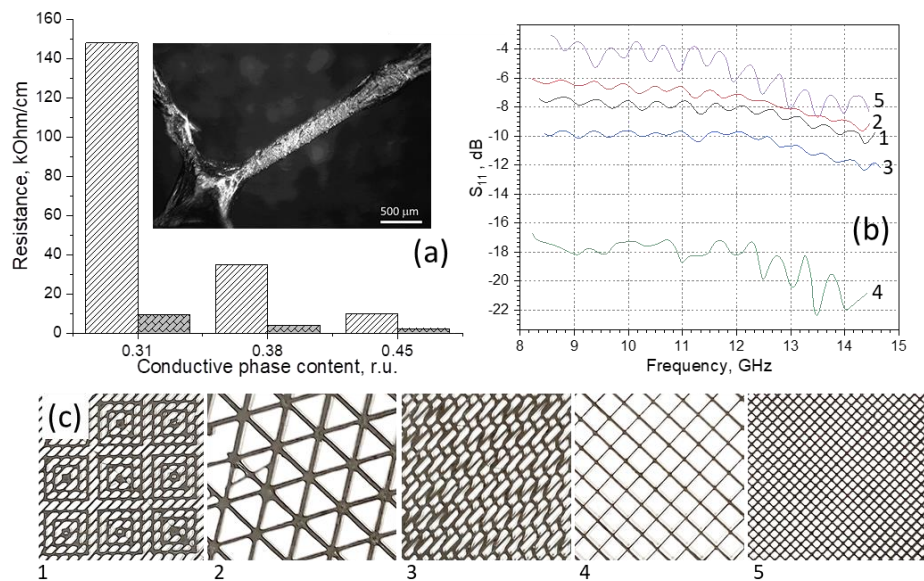


Fig.1. Diagram of the mesh wire resistance as a function of the conductive material content in the resistive paint (a). The resistance for the one (higher) and double-layer (lower) paint is shown. Reduction in high-frequency electromagnetic wave reflectivity for meshes with various geometries (b). The corresponding mesh designs are shown below (c). The inset in (a) provides an image of a painted mesh wire.

This work was supported by the NRFU grant #2023.04/0026.

1. S. Narayan, J. Sreeja, V. V. Surya, B. Sangeetha, R.U. Nair, Radar Absorbing Structures Using Frequency Selective Surfaces: Trends and Perspectives, J. Electron. Mater. 49 (2020) 1728–1741. <https://doi.org/10.1007/s11664-019-07911-2>.

УДК 54.06, 691, 53.091

МОРФОЛОГІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ПІНОПОЛІУРЕТАНІВ, ОДЕРЖАНИХ СПОСОБОМ ЗАЛИВКИ

О.А. Мікуліч, О.І. Гулай, Т.В. Фурс, В.Я. Шемет, О.В. Сад

*Луцький національний технічний університет,
43018 вул. Львівська, 75, Луцьк, Україна, e-mail: t.furs@lntu.edu.ua*

Пінополіуретани (ППУ) – це синтетичні пористі матеріали на основі поліуретану, які на 80-90% складаються з газової фази. Залежно від виду і співвідношення вихідних компонентів цей матеріал може бути жорстким або еластичним у значному інтервалі цих характеристик. Широкий рецептурний діапазон пінополіуретану дозволяє отримувати матеріал з різною густиною та унікальними фізико-механічними властивостями [1-5] й використовувати його у різних сферах промисловості: авіаційній, автомобільній, меблевій, будівництві та благоустрої будинків для тепло-, гідро-, шумоізоляції. Втім, цей перелік невичерпний, а поступово розширюється завдяки розвитку досліджень в напрямку модифікування поліуретанової матриці.

Метою роботи було дослідження впливу співвідношення вихідних компонентів на пористість і морфологію ППУ, отриманих способом заливки у форми.

Пінополіуретан отримували шляхом перемішування поліолу та ізоціанату, зважених у певних відсоткових співвідношеннях (1:1, 1:1,5, 1:2, 1,5:1, 2:1), до утворення однорідної суміші. У результаті хімічної реакції між компонентами відбувалося спінювання поліуретану з подальшим формуванням композицій.

Матеріал отриманих композицій є пористим з дрібнокомірковою структурою. Розміри пор залежать від вагового співвідношення компонентів. Зокрема, при однакових вагових частках компонентів (1:1) або коли у двокомпонентній суміші переважає вміст поліізоціанату (1:1,5 та 1:2), одержуються жорсткі піни з пористою дрібнокомірковою структурою. При цьому пористість пінополіуретану зростає у такому порядку вагових співвідношень компонентів поліол : ізоціанат – $1:1 < 1:1,5 < 1:2$ (рис. 1).

Примітно, що пористість центральної за об'ємом частини композиції однорідна, а по периферії – помітне зменшення пористості матеріалу з утворенням візуального шару певної товщини (рис. 1 (г)), так звана радіальна неоднорідність пористості на поверхні зрізу. Такий ефект можливий внаслідок обмеження спінювання матеріалу стінками форми. Водночас, можливий також вплив термодинамічного фактору на процес спінювання, формоутворення та затвердіння композицій.

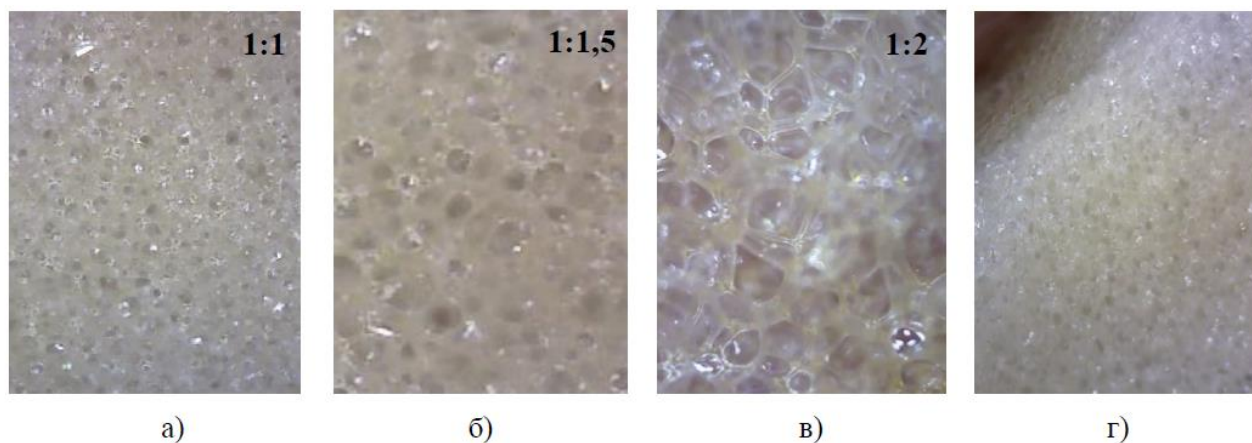


Рис. 1. Пористість жорсткого пінополіуретану

На основі отриманих результатів робимо висновок, що природа та вміст ізоціанату впливає на жорсткість піни. Збільшення вмісту ізоціанату зумовлює зростання жорсткості пінополіуретану, граничне вагове співвідношення компонентів у цьому випадку становить 1:1. У випадку співвідношень складових компонентів 1:2 отримано найбільш оптимальні за формою, морфологією і пористістю жорсткі композиції.

Натомість, у випадку зростання частки поліолу у ваговому співвідношенні з поліізоціанатом утворюються м'які й еластичні піни. Із збільшенням вмісту поліолу порівняно з ізоціанатом у суміші цих компонентів, порушується правильність форми композицій ППУ та зростає неоднорідність матеріалу за морфологією і пористістю (рис. 2).

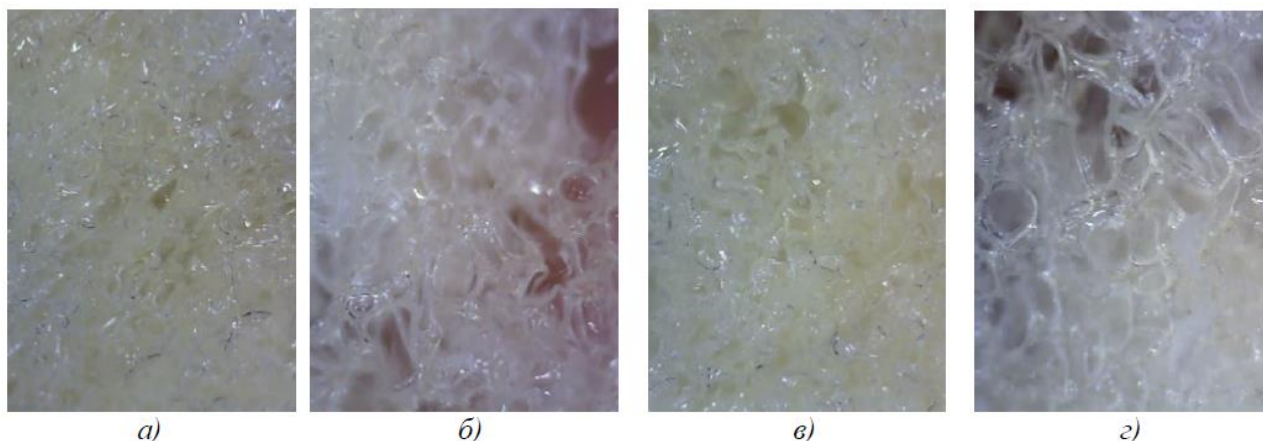


Рис. 2. Мікроструктура різних частин композицій м'якого ППУ:
а) і б) – $A : B = 1,5 : 1$; в) і г) – $A : B = 2 : 1$

Зміна співвідношень складових компонент, що використовуються при піноутворенні, дозволяє отримати різні типи піни ППУ з різними характеристиками для конкретного практичного застосування. Проведені дослідження є науково значимими в напрямку подальших напрацювань щодо модифікування матеріалу і властивостей ППУ.

1. Baferani, A.H., Keshavarz, R., Asadi, M. and Ohadi, A.R. (2018), Effects of Silicone Surfactant on the Properties of Open-Cell Flexible Polyurethane Foams. *Adv. Polym. Technol.*, 37: 71-83. <https://doi.org/10.1002/adv.21643>
2. Mantha, S., Chao, H., Ylitalo, A., Fitzgibbons, T., Zhou, W., Ginzburg, V., & Wang, Z. G. (2021). Effect of silicone surfactant on the CO₂ bubble nucleation in polyol. In *APS March Meeting Abstracts* (Vol. 2021, pp. R04-012).
3. Stanzione, M., Oliviero, M., Cocca, M., et al. Tuning of polyurethane foam mechanical and thermal properties using ball-milled cellulose, *Carbohydrate Polymers*, 231, 2020, 115772, <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2019.115772>.
4. F. Saint-Michel, L. Chazeau, J.Y. Cavaillé, E. Chabert. Mechanical properties of high density polyurethane foams: I. Effect of the density. *Compos. Sci. Technol.*, 66 (15) (2006), pp. 2700-2708. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2006.03.009>
5. Olena Mikulich, Olga Hulay, Tetiana Furs, Vasylyna Shemet. Strength and mechanical characteristics of modified polyurethane foams. *Procedia Structural Integrity* (January 2024) 59(21):460-465 DOI: 10.1016/j.prostr.2024.04.065 <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2024.04.065>

УДК 539.3

NUMERICAL METHODS FOR ANALYZING STRESS-STRAIN STATE OF ORTHOTROPIC PLATES OF MEDIUM THICKNESS

O.A. Mikulich, M.V. Delavskyi, N.M. Hamonin

Луцький національний технічний університет, вул. Львівська, 75, Луцьк, 43018, Україна
Lutsk National Technical University, Lvivska St. 75, Lutsk, 43018, Ukraine
shypra@ukr.net, delavski123@gmail.com, nazarii.hamonin@gmail.com

The paper highlights the use of numerical methods, particularly the Finite Element Method (FEM) and Boundary Element Method (BEM), for analysing the stress-strain state of orthotropic plates of medium thickness. These methods offer precise results for calculating stress distribution across various regions of the plate.

Orthotropic plates of medium thickness are frequently used in various engineering structures, including composite materials, aerospace, automotive, and construction industries. The assessment of their strength and behavior under load requires precise calculation of their stress-strain state (SSS). Due to the complexity of analytical solutions for orthotropic materials, numerical methods such as the finite element method (FEM), boundary element method (BEM), and analytical approximation methods are effective.

The study involves the use of specialized software for numerical modeling of orthotropic plates' stress-strain behavior. The software is developed using Python, leveraging FEM to discretize the plates into finite elements, allowing for the approximate determination of SSS in various regions of the plate. Orthotropic materials exhibit distinct mechanical properties along three mutually perpendicular axes, complicating SSS calculations compared to isotropic materials. Therefore, accounting for the plates' medium thickness becomes critical in obtaining accurate results, as classic thin-plate theories may not be applicable. The model includes bending moments and shear forces for precise analysis.

The application of FEM for analyzing the stress-strain state of orthotropic plates of medium thickness yields highly accurate results when using an adequate mesh and proper consideration of material anisotropy. Comparative analysis of different numerical methods shows that FEM provides the most precise results, while BEM reduces computational efforts in scenarios involving infinite or semi-infinite domains. The study also highlights the importance of selecting appropriate element types in FEM that account for the anisotropy and shear-deformation effects specific to orthotropic plates.

The use of numerical methods, particularly FEM, is an effective approach for evaluating the stress-strain state of orthotropic plates of medium thickness. The results demonstrate that FEM, with specialized elements for anisotropy and shear effects, provides accurate and reliable outcomes for complex structures in engineering applications. Future work will focus on refining the numerical models to account for more complex loading conditions and exploring the potential of hybrid numerical-analytical methods for further accuracy improvements.

1. Reddy, J.N. Theory and Analysis of Elastic Plates and Shells, 2nd ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2006.
2. Timoshenko, S.P.; Goodier, J.N. Theory of Elasticity, 3rd ed.; McGraw-Hill: New York, NY, USA, 1970.
3. Zienkiewicz, O.C.; Taylor, R.L. The Finite Element Method, 5th ed.; Butterworth-Heinemann: Oxford, UK, 2000.

Several established methods exist for determining material porosity in laboratory settings. One of the most common methods relies on knowing the true density of the sample material and the density of the porous material [2]:

$$\Pi = \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_t}\right) \cdot 100\%, \quad (1)$$

where ρ_t — is the density of the solid material of the sample, $\rho_v = \frac{m}{V}$ — is the density of the porous material, m and V are the mass and volume of the sample with pores.

Another method involves the value of the relative volume fraction V_V [2]:

$$\Pi = (1 - V_V) \cdot 100\%, \quad (2)$$

where V_V is the ratio of the matrix volume to the total sample volume.

Both methods allow accurate porosity measurements in labs with specialized equipment. However, this software enables porosity analysis based on images, using geometric and statistical approaches.

This application will be particularly valuable for architects, engineers, and construction professionals who work with architectural objects and materials. The ability to perform rapid, accurate area calculations for selected zones will streamline the design process and resource management, ensuring efficiency and high-quality results.

The software, based on the Swift language and the MVVM pattern, is a robust tool for analysing architectural objects and materials. Its capabilities for determining areas within selected zones and calculating porosity make it indispensable for professionals in architecture and construction. Future improvements will focus on user needs to enhance the application's functionality and effectiveness. Further development and improvement of the application will take into account the needs of users and ensure its greater efficiency and usefulness.

1. Wypych, G.: Handbook of Foaming and Blowing Agents; ChemTec Publishing: Toronto, ON, Canada, 2007.
2. Carolis, S., Putignano, C., Soria L., Carbonen G.: Effect of porosity and pore size distribution on elastic modulus of foams. International Journal of Mechanical Sciences, 2024. 261: 108661.

УДК 66.081.3:628.544:663.93

ВИСОКОЕФЕКТИВНІ СОРБЕНТИ НА ОСНОВІ КАВОВИХ ВІДХОДІВ

І.А. Мороз, О.Р. Левкович

Луцький національний технічний університет, м. Луцьк.

i.moroz@lntu.edu.ua

Кавові відходи, які щорічно генеруються у величезних кількостях у всьому світі, є надзвичайно цінним ресурсом, багатим на органічні сполуки, зокрема целюлозу, геміцелюлозу та лігнін [1]. Ці компоненти, за умови відповідної обробки, можуть бути трансформовані у вискоєфективні адсорбенти. Унікальна пориста структура та хімічний склад кавової гущі створюють передумови для розробки біоадсорбентів з високою адсорбційною ємністю щодо широкого спектру забруднювачів, включаючи важкі метали, органічні барвники та фармацевтичні препарати.

Розробка сорбентів на основі кавових відходів є надзвичайно важливим питанням, зважаючи на підвищену потребу в доступних та екологічно чистих методах очищення води та ґрунту. Кавові відходи як біоадсорбенти мають цілу низку переваг, найбільш значимими серед них є їх дешевизна та можливість повторного використання, що відповідає принципам циркулярної економіки та сталого розвитку [2]. Щорічно у світі утворюються мільйони тон кавової гущі, яка здебільшого направляється на сміттєзвалища. Перетворення цих відходів на

корисний продукт не лише зменшує навантаження на довкілля, але й створює додану вартість з матеріалу, який інакше був би втрачений.

Окрім того слід зважати на хімічну структуру кавових відходів, яка дозволяє легко модифікувати їх поверхню для підвищення селективності та ефективності сорбції. Завдяки різноманітності функціональних груп, які містяться у відходах кави, кавові сорбенти можуть бути ефективними для видалення як органічних, так і неорганічних забруднювачів.

Дослідження показують, що сорбенти на основі кавових відходів демонструють високу ефективність у видаленні важких металів, барвників, фармпрепаратів та інших забруднювачів з водних розчинів. Наприклад, модифіковані кавові сорбенти показали здатність видаляти до 90% йонів Плюмбуму та Купруму з водних розчинів, що порівняно з ефективністю комерційного активованого вугілля [3, 4].

Однак, слід зазначити, що розробка ефективних сорбентів на основі кавових відходів все ще стикається з певними викликами. Найчастіше для створення високої питомої поверхні адсорбційного матеріалу використовують два основні технологічні процеси – фізичну та хімічну активацію. Однак, якщо фізична активація кавових відходів за високих енергетичних витратах не завжди ефективна, то ефективність хімічної активації є високою, але несе подвійне навантаження на навколишнє середовище, за рахунок видалення надлишку хімічного активатора та високі корозійні ризики обладнання. Існують інші методи активації кавових відходів, які включають у себе ультразвукову та мікрохвильову обробку, дію глибоких евтектичних розчинників, обробку мікроорганізмами тощо. Для розробки ефективних та економічно вигідних адсорбентів з високою поглинальною здатністю необхідно оптимізувати процеси активації та модифікації. Це дозволить підвищити пористість і питому поверхню матеріалів, а також забезпечити стабільність їхніх характеристик протягом тривалого використання.

Розробка сорбентів на основі кавових відходів представляє собою перспективний напрямок досліджень, що поєднує ефективне управління відходами з створенням інноваційних матеріалів для екологічних застосувань. Подальші дослідження в цій галузі мають потенціал для створення нового покоління екологічно чистих та економічно вигідних сорбентів, які можуть зробити значний внесок у вирішення глобальних проблем забруднення навколишнього середовища.

1. Andrade C., Perestrelo R., Câmara J.S. Valorization of Spent Coffee Grounds as a Natural Source of Bioactive Compounds for Several Industrial Applications—A Volatilomic Approach. *Foods*. 2022. № 11. p. 1731.

2. Franca A.S., Oliveira L.S. Coffee processing solid wastes: current uses and future perspectives. *Agricultural wastes*. 2009. № 9. p. 155-189.

3. Cerino-Córdova F.J., Díaz-Flores P.E., García-Reyes R.B., Soto-Regalado E., Gómez-González R., Garza-González M.T., Bustamante-Alcántara E. Biosorption of Cu (II) and Pb (II) from aqueous solutions by chemically modified spent coffee grains. *International Journal of Environmental Science and Technology*. 2013. № 10. p. 611-622.

4. thi Quyen V., Pham T.H., Kim J., Thanh D.M., Thang P.Q., Van Le Q., Kim T. Biosorbent derived from coffee husk for efficient removal of toxic heavy metals from wastewater. *Chemosphere*. 2021. № 284. p. 131312.

СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ Tb₂₆Co_{6,4}In_{10,6} Г. П. Ничипорук, Д. Г. Димитриаді, Я.М. Каличак

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
halyna.nychporuk@lnu.edu.ua

Металеві сплави і сполуки є невичерпним джерелом сучасних матеріалів з унікальними властивостями, для прикладу сполуки рідкісноземельних металів із кобальтом є потужними постійними магнітами. Продовжуючи наші систематичні дослідження сплавів систем РЗМ–Co–In, зокрема системи з тербієм, виявлено існування сполуки ~Tb₂₆Co₆In₁₁, вивченню кристалічної структури якої присвячене це повідомлення.

Сплави отримували за допомогою електродугового сплавляння компактних тербію, кобальту та індію високого ступеня чистоти в атмосфері очищеного аргону під тиском $0,5 \times 10^5$ Па. Контроль складу сплавів здійснювали шляхом порівняння маси зразка після плавлення з масою шихти. Гомогенізацію зразків проводили у вакуумованих кварцових ампулах при 600 °C впродовж двох місяців, з наступним гартуванням у холодній воді без розбивання ампул. Дослідження мікроструктури сплавів провели на сканувальному електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMU, оснащеному енергодисперсійним X-променевим мікроаналізатором системи Oxford Instruments Aztec ONE з детектором X-Max^{N20}. Масиви експериментальних інтенсивностей досліджуваних зразків отримали на автоматичному дифрактометрі STOE STADI P з лінійним позиційно-прецизійним детектором PSD за схемою модифікованої геометрії Гінье (Cu K α_1 -випромінювання; увігнутий Ge-монохроматор типу Іоганна; інтервал кутів $6,000 \leq 2\theta \leq 110,625$ з кроком $0,015^\circ 2\theta$, час сканування в кроці 250 с).

За результатами мікроструктурних досліджень сплавів складів Tb₅₀Co₂₅In₂₅, Tb₅₅Co₂₅In₂₀, Tb₆₀Co₂₀In₂₀ у кожному з них було виявлено фазу Tb₆₀Co₁₅In₂₅, склад якої не відповідав жодній з відомих сполук системи Tb–Co–In. X-променевий фазовий аналіз зразка Tb₆₀Co₂₀In₂₀ вказав на присутність невідомої фази та додатково сполуки Tb₆Co₂In (структурний тип HoCo₂Ga). Склад нової сполуки, розташування та інтенсивності ліній на дифрактограмі дозволили зробити припущення про її ізоструктурність до Lu₂₆Pt_{7,55}In_{9,45} [1] (структурний тип Sm₂₆Co₁₁Ga₆ [2]).

Кристалічну структуру нової сполуки (як стартові вибрано параметри атомів сполуки Lu₂₆Pt_{7,55}In_{9,45}, комплекс програм Fullprof) уточнено при складі Tb₂₆Co_{6,4}In_{10,6}: просторова група *P4/mbm*, $a = 11,902(7)$; $c = 15,836(10)$ Å; $V = 2243(2)$ Å³, $R_{\text{Bragg}} = 15,4$; $R_F = 11,0$; $R_p = 4,30$; $R_{\text{wp}} = 5,45$ %. Вміст фази у зразку становить ~73 мас. %. Іншою фазою (~27 мас. %) є Tb₆Co₂In (просторова група *Immm*, $a = 9,452(6)$; $b = 9,518(6)$; $c = 9,973(6)$ Å; $V = 897(1)$ Å³). Міжатомні віддалі добре узгоджуються з сумою відповідних атомних радіусів.

Сполука Tb₂₆Co_{6,4}In_{10,6}, як і сполуки цього типу у системах РЗМ–Co–Ga характеризуються наявністю різного складу статистичних сумішей менших за розмірами атомів (Co/Ga) і відповідно змінним складом вздовж ізоконцентрат РЗМ (Sm₂₆Co_{5,2-6}Ga_{11,8-11}; Tb₂₆Co_{9,4}Ga_{7,6}; Ho₂₆Co_{6,7}Ga_{10,3}). Подібну картину можна спостерігати і для відомих сполук у системах індію: Lu₂₆Rh_{6-8,5}In_{11-8,5}, Lu₂₆Ir_{6-11,58}In_{11-5,39}, Lu₂₆Pt_{7,55}In_{9,45}.

Автори вдячні за фінансову підтримку фонду Simons Foundation (Award ID: 1290588).

1. Gulay N.L., Kusters J., Kai Reimann M., Kalychak Ya.M., Pottgen R. Lu₂₆T_{17-x}In_x ($T = \text{Rh, Ir, Pt}$) – first indium intermetallics with Sm₂₆Co₁₁Ga₆ type structure. *Z. f. Naturforsch.* 2022. Vol. 77b. P. 735–741.

2. Yarmolyuk Ya. P., Grin' Yu. N., Olesh O. M. *Sov. Phys. Crystallogr.* 1980, 25, 143–146.

УДК 539.5:678

ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ ДЛЯ 3D ДРУКУ. ЇХ ВЛАСТИВОСТІ ТА ЗАСТОСУВАННЯ Ощатовська Н. В.

*Нововолинський науковий ліцей, Нововолинськ, Україна
natalia.matsyuk@gmail.com*

Технологія 3D-друку – це технологія, яка швидко розвивається в наші дні та широко використовується у світі. Використання об'єктів, отриманих з різних полімерних матеріалів за допомогою 3D-друку, стає все більш поширеним у нашому суспільстві, а саме від побутових виробів, харчових упаковок до застосування у різних галузях промисловості (аерокосмічній, електронній, біомедичній, військовій, харчовій та ін.). Властивості полімерних матеріалів, отриманих за допомогою різних технологій 3D-друку, останнім часом, активно досліджуються науковцями. На сьогодні актуальним завданням є вибір технології і полімерних матеріалів для 3D-друку, щоб створювати 3D-об'єкти максимально швидко та з покращеними властивостями.

Метою даної роботи було отримати за допомогою 3D друку полімерні матеріали сформовані на основі PLA, ABS, ABS+ PETG та Nylon – пластиків (технологія FDM) та дослідити їх міцність.

Вибір різних пластиків для 3D друку з кращими механічними властивостями дозволить створювати вискоєфективні матеріали, які можуть допомогти «ДрукАрмії» – спільноті українців, яка вже понад рік виготовляє (друкує) все, що може бути корисним для використання воїнами ЗСУ у захисті України від російських загарбників.

Нами отримано за допомогою 3D друку моделі зразків полімерів сформовані на основі PLA, ABS, PETG та Nylon – пластиків (технологія FDM) та досліджена їхня міцність. На механічні властивості полімерних матеріалів, отриманих за допомогою технології FDM, впливатимуть численні технологічні змінні, які включають, товщину шару, рівень заповнення, швидкість друку, швидкість подачі, температуру робочої пластини, температуру екструзії, діаметр нитки, діаметр сопла і напрямок друку.

На рис. наведені зображення PLA-пластику різних кольорів. З отриманих зображень PLA-пластику можна зробити висновок, що можливий вплив кольорового пігменту на наплення шарів пластику під час друку або умови та спосіб друку.

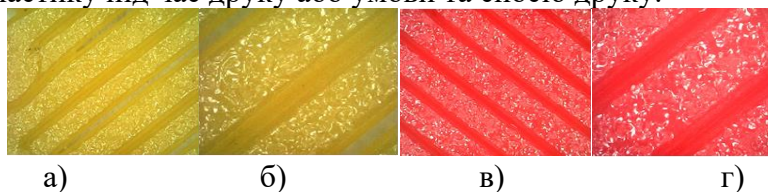


Рис. Зображення PLA-пластику різних кольорів отримані за допомогою цифрового електронного USB мікроскопу при збільшенні в (а), (в) в 500Х та (б), (г) в 1000Х

Підтверджено, що важливим є вибір не тільки технології 3D друку, а й матеріалів для цього, оскільки на сьогодні в Україні залишається актуальним пошук бюджетного пластику для виготовлення міцних деталей і застосувань у військовій промисловості. Досліджено міцність вибраних пластиків, що використовуються у FDM технології двома способами. Встановлено, що найбільш міцним та бюджетним пластиком є ABS. Такі характеристики дозволять використати його для друку різних моделей з широким колом застосувань. Для PLA пластика характерна середня міцність, але цей полімер є відносно крихким. PETG має хороші механічні властивості, але при збільшенні товщини матеріалу відбувається збільшення відносного видовження та деформація зразка, з появою чітких волокон пластику. Nylon – це еластичний полімер, зі специфічними властивостями та найбільшим подовженням при розриві.

УДК 624.012.044

РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ МАЛОЦИКЛОВОЇ ВТОМЛЕНОСТІ ДРІБНОЗЕРНИСТОГО ТА КРУПНОЗЕРНИСТОГО БЕТОНІВ

Ю.М. Панчук, В.С. Довбенко, О.Ю. Дейнека

Національний університет водного господарства та природокористування, Рівне, Україна,
e-mail: y.m.panchuk@nuwm.edu.ua

В результаті випробувань бетонів, досліджених на вплив малоциклових навантажень, отримані формули малоциклової втомиленості дослідних призм, була прийнята дрібно-лінійна функція у вигляді залежності $\eta_{\text{сус}}$ - $n_{\text{сус}}$:

для дрібнозернистого бетону (ДЗБ):

$$\eta_{\text{сус}} = 1 - 0,094(n_{\text{сус}} - 1)/(n_{\text{сус}} + 2,499); \quad (1)$$

для крупнозернистого бетону (КЗБ-1):

$$\eta_{\text{сус}} = 1 - 0,159(n_{\text{сус}} - 1)/(n_{\text{сус}} + 3,606); \quad (2)$$

для крупнозернистого бетону (КЗБ-2):

$$\eta_{\text{сус}} = 1 - 0,253(n_{\text{сус}} - 1)/(n_{\text{сус}} + 11,490); \quad (3)$$

З отриманих залежностей (1-3) випливає, що при граничних значеннях вони набуватимуть фізичного змісту, так при $n_{\text{сус}} \rightarrow \infty$ значення $\eta_{\text{сус}} = 0,906$; $0,841$ і $0,747$ відповідатимуть межах малоциклової втомиленості відповідно для ДЗБ; КЗБ-1 і КЗБ-2. Малоциклова втомиленість бетонів, отримана відповідно до залежностей (1-3) являє собою криву гіперболічного типу в осях координат «рівень напружень $\eta_{\text{сус}}$ – кількість циклів навантаження $n_{\text{сус}}$ », які витримував зразок до руйнування (рис.1).

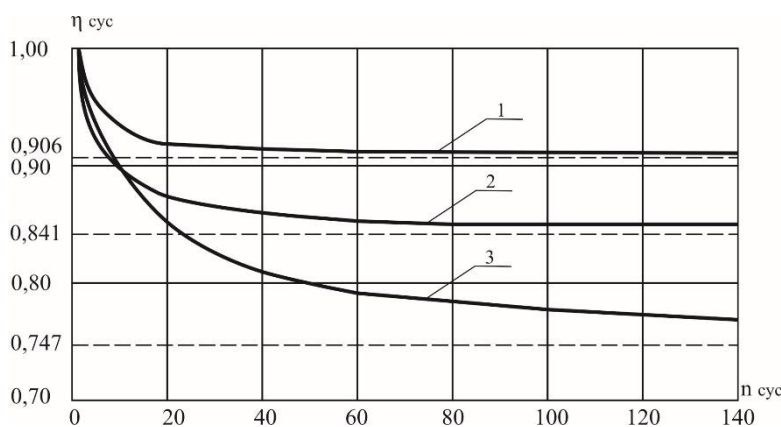


Рис. 1 Малоциклова втомиленість бетонів ДЗБ (1); КЗБ – 1 (2); КЗБ – 2 (3)

Наявність крупного заповнювача в бетонах зразків з КЗБ-1 і КЗБ-2, а також хімічні процеси, що відбуваються в цементній складовій КЗБ-2, обумовлені дією добавки «Дофен» на цементну складову, усадка бетону, знижують межу малоциклової втомиленості [1]. Більш однорідна структура матеріалу і відсутність крупного заповнювача в зразках з КЗБ, викликають підвищення малоциклової втомиленості в порівнянні з бетонами КЗБ-1 та КЗБ-2 [2].

1. Панчук Ю.М. Експериментальні дослідження пружно-пластичних властивостей крупнозернистого бетону за малоциклових навантажень високих рівнів. Ресурсоекономні матеріали, конструкції, будівлі та споруди. Вип 23. Рівне, 2012. С. 372-377.

2. Бабич Е.М., Крусь Ю.А., Панчук Ю.М. Работа мелкозернистого бетона в условиях малоциклового статического нагружения. Изв. вузов. Сер. Строительство. 1995. №8. С. 26-32.

УДК 620

ВПЛИВ ПРАННЯ НА ВИДІЛЕННЯ МІКРОПЛАСТИКУ З ПОЛІЕФІРНИХ ТКАНИН

О.В. Пахوليук, О.І. Передрій

Луцький національний технічний університет
o.pakholiuk@lntu.edu.ua, o.peredriy@lntu.edu.ua

Мікропластик, який виділяється з текстилю під час процесу прання, є найпоширенішим типом мікрочастинок, які зустрічаються в різних середовищах та екосистемах по всьому світу.

Забруднення навколишнього середовища мікропластиком, фрагментами пластику розміром менше 5 мм, є глобальною проблемою, яка стала особливо актуальною в останні роки. У 2017 році було підраховано, що мікропластик, який виділяється з текстильних виробів під час процесу прання, отримав назву «мікрОВОлокна», становить близько 35% глобального забруднення океану первинним мікропластиком.

Вперше у 2011 році присутність синтетичних мікрОВОлокон у навколишньому середовищі була пов'язана з пранням синтетичного одягу. Виділення мікрОВОлокон під час процесу прання синтетичних текстильних виробів відбувається через механічні та хімічні навантаження, яких одяг зазнає в пральних машинах, і через їхні розміри не всі мікрОВОлокна, що вивільняються, можуть бути заблоковані очисними спорудами, досягаючи до морів і океанів і становлять ризик для екосистеми.

Існує кілька досліджень виділення мікрОВОлокон під час процесу прання синтетичних текстильних виробів із застосуванням різних процедур. Використовуючи процедуру багатоступеневої фільтрації всього об'єму води, залученої під час реального тесту на прання, і гравіметричного визначення кількості вивільненого мікропластику було оцінено, що вивільнення коливається від 124 до 308 мг мікрОВОлокна на кг випраної тканини, що відповідає кількості мікрОВОлокон від 640 000 до 1 500 000. Крім того, використовуючи процедуру фільтрації всього об'єму води для прання за допомогою фільтра з розміром пор 25 мкм, безпосередньо прикріпленого до кінця зливного шланга, було підраховано, що прання приблизно 6 кг акрилових тканин виділяє понад 700 000 мікрОВОлокон у один процес прання.

Синтетичні мікрОВОлокна були ідентифіковані у зразках опадів з узбережжя морів і берегів річок, наземних і прісноводних екосистем, внутрішнього середовища, їжі, питної води, а також у травному тракті багатьох водних і наземних організмів. У світлі того факту, що мікрОВОлокна у великій кількості присутні в навколишньому середовищі, оцінка їх токсичності для риб і ґлибоводних організмів була проведена в кількох дослідженнях.

Виділення мікрОВОлокон під час процесу прання синтетичних текстильних виробів відбувається через механічні та хімічні навантаження, яких одяг зазнає в пральних машинах. Кілька параметрів процесу прання, умови, формули добавок для прання були пов'язані з виділенням мікрОВОлокна, і деякі з них, як було виявлено, впливають на виділення мікрОВОлокна під час процесу прання, тоді як кореляція між виділенням мікрОВОлокна та завантаженням прання не була оцінена.

Вивільнення мікрОВОлокна оцінюється як функція завантаження білизни в реальному процесі прання, що вказує на прогресуюче зменшення вивільнення мікрОВОлокна зі збільшенням завантаження прання. Кількість виділених мікрОВОлокон збільшилася приблизно в 5 разів за рахунок зменшення завантаження білизни завдяки синергічному ефекту між співвідношенням об'єму води та тканини та механічним навантаженням під час прання.

Крім того, вищий механічний вплив, якому піддається тканина у разі низького навантаження на прання, перешкоджає розрізненню впливу на вивільнення інших параметрів прання, таких як тип миючого засобу та добавок для прання, що використовуються.

У такому сценарії важливо оцінити кількість мікропластику, який може виділятися з синтетичного одягу під час процесу прання, і співвіднести виділення мікропластику з композицією миючого засобу/процесом прання/структурою текстилю, щоб визначити зв'язки та можливі параметри впливу. У багатьох дослідженнях вивчалася роль різних складів тканини: найбільш досліджуваним текстилем був поліестер, домінуюче синтетичне волокно на ринку текстилю, обидва в лабораторному моделюванні тестів прання і в побутових пральних машинах, а також перероблений поліестер і первинний поліестер, поліамід, акрил, бавовняні тканини, суміші поліестер/бавовна та суміші поліестер/елестан.

Загальна тенденція підтвердила, що миючий засіб спричинив більший викид щодо тестів прання, проведених лише з водою, і найбільше вивільнення було оцінено у випадку натуральних або штучних волокон порівняно з синтетичними.

Крім того, кілька вчених досліджували виділення мікрОВОлокна з різних типів одягу з використанням різних завантажень прання в реальній пральній машині, підкреслюючи, що завантаження прання може суттєво впливати на вивільнення мікрОВОлокна. Відмінності в методах, застосованих для кількісного визначення вивільнення мікрОВОлокна, і особливо в таких параметрах, як завантаження білизни, ускладнюють порівняння результатів і можуть поставити під загрозу оцінку впливу певного параметра на вивільнення.

Порівнюючи результати, отримані під час випробувань прання, виконаних у реальній пральній машині з різними завантаженнями прання, можна було оцінити ефект вивільнення як функцію завантаження. Було виявлено, що мікрОВОлокна, вивільнені під час проведених випробувань на прання, зменшилися з 4 766 338 Н/кг при найнижчому завантаженні прання до 1 041 736 Н/кг, отриманому при завантаженні 2,50 кг.

З результатів стало очевидно, що завантаження прання сильно впливає на кількість мікрОВОлокна, що виділяється з одягу під час процесу прання. Ці результати були отримані з обмеженою кількістю повторів ($n = 2$), що перешкоджало статистичному аналізу. Різне завантаження білизни, протестоване під час випробувань прання, передбачало використання великої кількості одягу на тест, який коливався від 1 до 17 футболок на кожен тест та використання загалом 80 футболок, що ускладнювало кількість повторів. доступний. Необхідно підкреслити, що використання такої низької кількості повторів ($n = 2$) є обмеженням для статистичної перевірки отриманих результатів. Тим не менш, велика різниця в даних і низькі стандартні відхилення дозволяють визначити чітку тенденцію випуску і підкреслити, що менше завантаження прання негативно впливає на відшарування мікрОВОлокна.

1. Napper, I. E. & Thompson, R. C. Release of synthetic microplastic plastic fibres from domestic washing machines: effects of fabric type and washing conditions. *Mar. Pollut. Bull.* 112(1–2), 39–45. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.09.025> (2016).
2. De Falco, F., Pace, E., Cocca, M. & Avella, M. The contribution of washing processes of synthetic clothes to microplastic pollution. *Sci. Rep.* 9, 6633.
3. De Falco, F., Cocca, M., Avella, M. & Thompson, R. C. Microfiber release to water, via laundering, and to air, via everyday use: a comparison between polyester clothing with differing textile parameters. *Environ. Sci. Technol.* 54(6), 3288–3296.

УДК 665.637.8

ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ БІТУМУ, МОДИФІКОВАНОГО ПАР НА ОСНОВІ ВІДНОВЛЮВАНОЇ СИРОВИНИ

О.Є. Поляк, В.М. Гунька

Національний університет «Львівська політехніка» 79013, м. Львів, вул. С. Бандери, 12,
olha.y.poliak@lpnu.ua

Традиційний немодифікований асфальтобетон, основним компонентом якого є нафтовий дорожній бітум, не може забезпечити необхідні фізико-механічні властивості для довготривалої експлуатації дорожнього покриття. Одним з основних фізико-механічних показників в'язучого є зчеплюваність з поверхнею мінеральних матеріалів. Через слабку адгезію бітуму до кам'яних матеріалів виникають тріщини, вибоїни, зменшується водо- та морозостійкість, що значно скорочує довговічність асфальтобетонного покриття. Цей показник визначає міцність і довговічність доріг. Зазвичай зчеплення бітуму з мінеральними матеріалами досягається шляхом додавання спеціальних добавок, які покращують адгезію між бітумом і мінеральним заповнювачем [1].

В роботі було визначено адгезійні властивості немодифікованого і модифікованого бітумів, а саме зчеплюваність із поверхнями скла та щебню. Модифікування окисненого бітуму здійснювали адгезійною добавкою амідного типу (А), одержаною методом амідуння ріпакової олії поліаміном. Результати зчеплюваності бітуму з мінеральними матеріалами наведено в таблиці 1 [2-3].

Таблиця 1. Зчеплюваність бітуму з мінеральними матеріалами

Назва	Адгезія до щебню, балів	Адгезія до скла, %
Вимоги до бітуму модифікованого адгезійними добавками згідно СОУ 45.2-00018112-067:2011	5	75
Бітум БНД 70/100	3	26,1
Бітум + 0,2 % А	4,5	65,8
Бітум + 0,4 % А	5	85,1
Бітум + 0,6 % А	5	94,2
Бітум + 1 % А	5	98,6

Встановлено, що оптимальний вміст адгезійної добавки становить 0,4 % мас., адже додавання ПАР до в'язучого у даній кількості дозволяє покращити адгезію до щебню з 3 балів до 5 та адгезію до скла з 26,1% до 85,1 %. Дані значення відповідають вимогам до показників зчеплюваності бітуму до поверхні скла та щебню, модифікованого адгезійними добавками марки БНД-А 70/100 згідно СОУ 45.2-00018112-067:2011.

1. Старчевський, В. Л., Гринчук, Ю. М., & Маціпура, П. А. (2021). Адгезійні властивості бітуму, модифікованого епоксидом рослинного походження у присутності ініціаторів. Науковий вісник НЛТУ України, 31(3), 85-88.

2. ДСТУ 9169:2021 Бітум та бітумні в'язучі. Визначення зчеплюваності з мінеральним матеріалом.

3. СОУ 45.2-00018112-067:2011 Будівельні матеріали. Бітуми дорожні в'язкі, модифіковані добавками адгезійними. Технічні умови. Зміна № 1.

СПЕКТРОСКОПІЯ КОМБІНАЦІЙНОГО РОЗСІЯННЯ ТА РЕНТГЕНОСТРУКТУРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ СПЛАВІВ Ga-Ge-Te

М. Попович ¹, Г. Кочубей ¹, К. Шпортько ¹, О. Стронський ¹, А. Лотник ²

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В. Лашкарьова НАН України, Київ, Україна
kochubei.hanna@gmail.com

²Leibniz Institute of Surface Engineering, Permoser str. 15, 04318 Leipzig, Germany,
andriy.lotnyk@iom-leipzig.de

Халькогенідні стекла, а в тому числі і родина сплавів Ga-Ge-Te цікаві завдяки універсальному застосуванню в далекій інфрачервоній оптиці, пам'яті на основі фазових змін та різноманітних сенсорах [1]. Серед інших халькогенідів, GaGeTe виділяються своїм винятково великим вікном пропускання – від 2 мкм до 28 мкм, а додавання Ga до сплавів GeTe може впливати на час кристалізації та стабільність при кімнатній температурі [1]. Відповідно, краще розуміння структурних особливостей може допомогти в оптимізації властивостей, в тому числі чутливості та процесів формування рельєфу в структурах на основі халькогенідних стекел Ga-Ge-Te, які є перспективними для прямого запису оптичних елементів, ІЧ оптиці, сенсоріці та інших практичних застосувань.

В даній роботі досліджено аморфні сплави Ga-Ge-Te методами рентгенівської дифракції та Раманівської спектроскопії. Досліджувані об'ємні сплави Ga-Ge-Te були отримані традиційним методом гартування розплаву. Склад контролювали за допомогою EDX-спектроскопії. Рентгенівські дифракційні картини зразків реєстрували на рентгенівському дифрактометрі з геометрією Брегга-Брентано, використовуючи Cu K α випромінювання 1.54178 Å і вмонтований графітовий монохроматор для дифрагованого пучка. Дифракційні дані були зібрані в діапазоні величин вектора розсіювання Q між 0.4 і 8 Å⁻¹, $Q = 4\pi \sin \theta / \lambda$. Усі зразки досліджували в геометрії пропускання. Раманівські спектри зразків Ga-Ge-Te вимірювали в спектральному діапазоні від 50 до 400 см⁻¹ з роздільною здатністю 1 см⁻¹, в кожному експерименті було зібрано 256 сканів. Усі рентгенівські та раманівські експерименти проводили при кімнатній температурі.

Експериментальні рентгенівські дифракційні картини (рис. 1) підтвердили аморфну структуру сплавів і були використані для розрахунків функцій радіального розподілу. В результаті чого було знайдено положення найближчого сусіднього зв'язку r_1 і другого сусіднього зв'язку r_2 .

Отримані значення r_1 (2,65 Å для стекел Ge_{0,19}Te_{0,81} і Ga_{0,079}Ge_{0,114}Te_{0,806}) виявилися близькими до відомих з літературних джерел для стекел Ge-Te та Ga-Ge-Te інших складів. Значення відношення r_2 / r_1 становлять 1,63 і 1,68 відповідно, що близько до типового значення 1,63 для структури правильного тетраедра. Розраховані значення кута зв'язку ϕ також добре узгоджуються з іншими опублікованими даними для стекел GaGeTe та Ge-Te. Спостережувані смуги в спектрах комбінаційного розсіювання в досліджених сплавах Ga-Ge-Te показують, що такі скла містять різні нанофази і можуть бути пояснені в термінах коливальних мод стекел і плівок Ga-Te і Ge-Te.

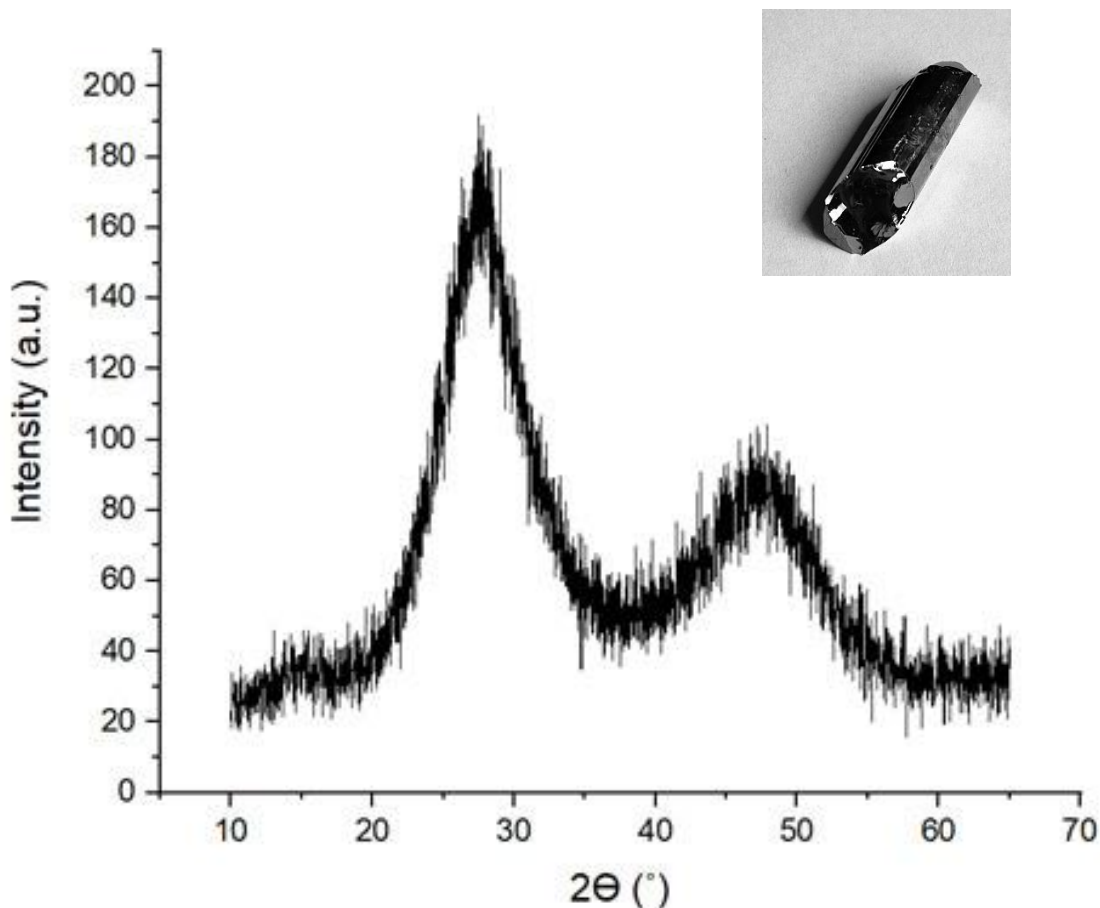


Рис. 1 XRD данні для $\text{Ge}_{0.19}\text{Te}_{0.81}$ та фото скла $\text{Ge}_{0.19}\text{Te}_{0.81}$

1. Popovych M.V., Stronski A.V., Shportko K.V. Structural properties of $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$ alloys. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2022. V. 23, No. 4 pp. 830-835.

УДК 544.2

СИНТЕЗ ГІБРИДНОГО МАТЕРІАЛУ НА ОСНОВІ АМІНОКРЕМНЕЗЕМУ ТА МЕТАЛ-ОРГАНІЧНОГО КООРДИНАЦІЙНОГО ПОЛІМЕРУ

Н.В. Роїк, Л.О. Белякова

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Олега Мудрака, 17, Київ, 03164, Україна, e-mail: roik_nadya@ukr.net*

Кремнеземи є перспективними неорганічними матрицями для створення високоселективних сорбційних матеріалів, каталізаторів, сенсорів, носіїв біологічно активних сполук. У даній роботі запропоновано новий підхід для одержання гібридного матеріалу на основі органокремнезему типу MCM-41 з поверхневими 3-амінопропілними групами та метал-органічного полімеру ZIF-8, що складається з тетраедрично координованих іонів Zn^{2+} та імідазольних лінкерних груп.

Синтез ZIF-8/ NH_2 -MCM-41 здійснювали шляхом вирощування кристалів ZIF-8 на поверхні органокремнеземного носія у водному середовищі при кімнатній температурі. Оскільки кристалічна структура метал-органічних полімерів у значній мірі залежить від зовнішніх чинників (температури, тиску, ультразвукової обробки і т.п.) та складу реакційної суміші (природи розчинника, металічного прекурсора та ліганда, їх співвідношення), то для одержання гідролітично стійких частинок ZIF-8 з ромбічною додекаедральною кристалічною

структурою використовували $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ та 2-метилімідазол у мольному співвідношенні 1:40. Гібридну морфологію одержаного матеріалу підтверджено методом скануючої електронної мікроскопії. Встановлено, що на поверхні сферичних частинок амінокремнезему відбувається ріст ромбічних додекаедральних кристалів ZIF-8 розміром до 0.2 мкм з гладкою поверхнею граней та чітко вираженими ребрами. Згідно результатів рентгенофазового аналізу, на дифрактограмі ZIF-8/ NH_2 -MCM-41 реєструються інтенсивні характеристичні піки ZIF-8 (Рис. 1). Аналіз ізотерм низькотемпературної адсорбції-десорбції азоту підтверджує формування метал-органічних кристалів з мікропористою структурою на поверхні мезопористого органокремнеземного носія (відбувається збільшення питомої поверхні від 512 до 617 m^2/g та з'являються мікропори діаметром 1.49 нм).

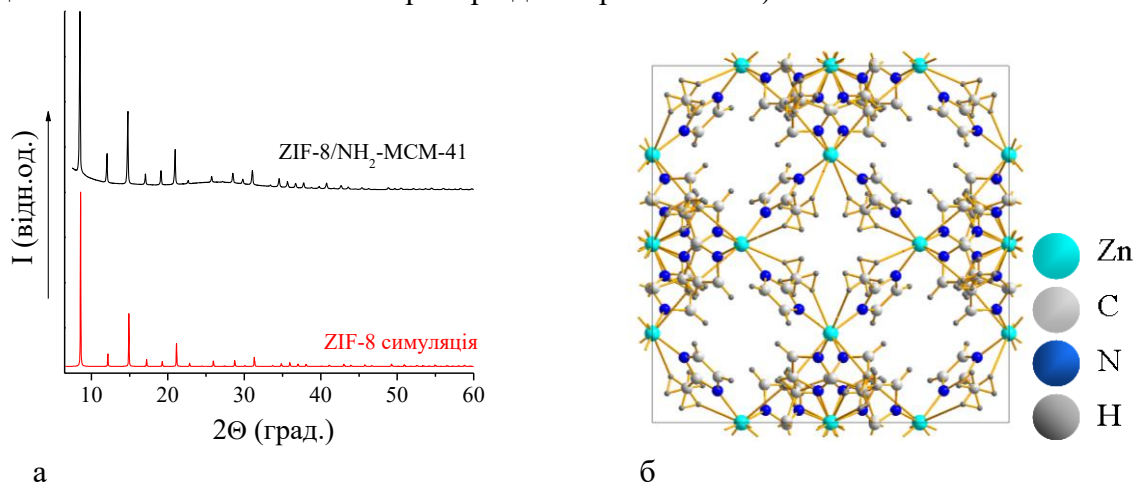


Рисунок 1. Дифрактограми (а) та кристалічна структура (б) ZIF-8 та ZIF-8/ NH_2 -MCM-41.

Таким чином, було здійснено успішний синтез ZIF-8/ NH_2 -MCM-41 на основі амінокремнезему та метал-органічного координаційного полімеру, досліджено його морфологію, кристалічну та пористу структуру. Показано, що одержаний гібридний матеріал поєднує унікальні структурні характеристики та хімічні властивості ZIF-8 з перевагами кремнеземного субстрату.

УДК 535

ELECTRONIC STRUCTURE AND LUMINESCENCE OF POTASSIUM SULFATE CRYSTAL

M.Ya. Rudysh¹, R.S. Brezvin¹, O.Yu. Khyzhun², V.Yo. Stadnyk¹, P.A. Shchepanskyi²,
M. Piasecki³, N.M. Melnykova⁴, A. Kotlov⁵, A.S. Voloshinovskii¹, T.M. Pasitskyi¹

¹Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv, 8 Kyrylo and Mefodiy str., UA79005, Lviv, Ukraine, rudysh.myron@gmail.com

²Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine, 3 Krzhyzhanovsky str., UA03142, Kyiv, Ukraine

³Faculty of Science and Technology, J. Długosz University, 13/15 Armii Krajowej al., PL-42-201, Częstochowa, Poland

⁴Institute of Plant Physiology and Genetics, National Academy of Sciences of Ukraine, 31/17 Vasylkivska Street, 03022 Kyiv, Ukraine

⁵Photon Science at DESY, Notkestrasse 85, 22607, Hamburg, Germany

The study of dielectric crystals belonging to the group of materials A_2BX_4 (where $\text{A} = \text{Li}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Na}, \text{Cs}, \text{NH}_4$, $\text{B} = \text{S}, \text{Se}, \text{Zn}, \text{Be}$, $\text{X} = \text{O}, \text{F}, \text{Cl}$) is of great importance both theoretically and

practically. These materials are promising for use in optoelectronic systems and as matrices for modifying impurities. Their transparency across a wide spectral range makes them suitable for use in the UV part of the spectrum and in nonlinear optics [1–3]. Recently, there has been active research into the optical, electronic, and luminescent properties of crystals in the A_2BX_4 group, using both experimental methods and theoretical models.

K_2SO_4 crystals represent the mentioned group of dielectric materials and can exist in α , β , and γ modifications [4,5]. The crystals obtained from an aqueous solution are known to be transparent and colourless. β - K_2SO_4 exists at temperatures below 860 K and possesses a symmetry point group mmm [6]. Studies on optical spectra, particularly under the influence of uniaxial pressures and temperature changes, have been conducted in works [7,8].

We conducted an experimental study to clarify the features of electronic states in the β - K_2SO_4 crystal. This involved using X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and X-ray emission spectroscopy (XES) to examine the electronic structure. The electronic spectrum was obtained from theoretical calculations using the density functional theory and known exchange-correlation functionals. Additionally, we gathered information about the electronic structure from the measured luminescence spectra and luminescence excitation spectra of the crystal when excited by synchrotron radiation.

β - K_2SO_4 single crystal was grown by slow evaporation method from an aqueous solution. In the work, the structure of the electronic levels of the β - K_2SO_4 crystal was investigated using density functional theory methods and experimental methods of XPS and XES spectroscopy, as well as luminescence spectroscopy. It is shown that implementation of widely used LDA and GGA-PBESol functionals for the geometric optimization of the crystal structure gives well-known deviations in the lattice parameters, resulting in corresponding underestimation ($\sim 3.5\%$) and overestimation (by $\sim 1.9\%$) of the lattice parameters. The use of the RSCAN hybrid functional gives better results for geometric optimization (the deviation is in the range of 0.67 - 1.22%). The energy levels were identified, and the band gap value was estimated to be 7 eV. After evaluating the deviation of structural parameters, it is proposed to use a hybrid functional to optimize the crystal structure for materials of the A_2BX_4 group. The highest E_g value is 7.89 eV, as obtained using the B3LYP functional, and is probably overestimated by ~ 0.7 eV relative to the experimental value, similarly to the case of β - $LiNH_4SO_4$ crystal. Other functionals give lower values, which are in agreement with other theoretical results.

Electronic level structure was investigated using XPS and XES spectroscopy, and the theoretical results were confirmed. The binding energies of electrons in the crystal were measured, and excitation and luminescence spectra at $T = 80$ K were studied using synchrotron radiation.

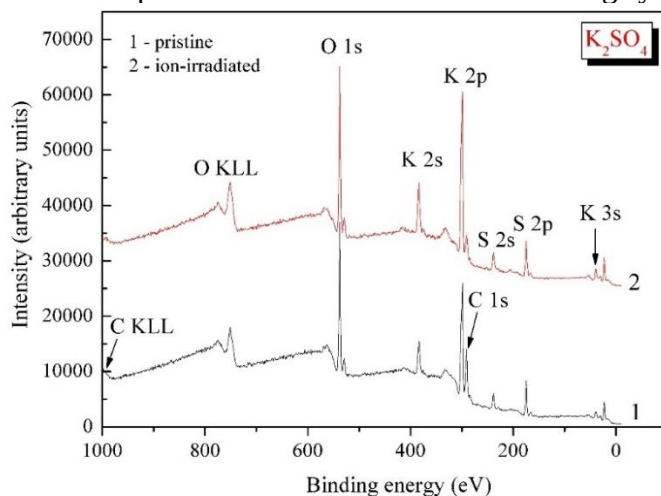


Fig. 1. Survey XPS spectra of (1) pristine and (2) Ar^+ -ion treated surfaces of the K_2SO_4 crystal.

Using synchrotron radiation, a study of the luminescent characteristics of the β -K₂SO₄ crystal was carried out. It is shown that the emission spectrum is represented by a broad band with a half-width of 0.83 eV. The maximum of this band is at the energy of $h\nu_{em} = 2.95$ eV. The luminescence spectrum of β -K₂SO₄ can be considered as the luminescence of a molecular exciton autolocalized on the SO₄²⁻ anionic complex. The luminescence excitation spectrum for the emission band at $\lambda = 340$ nm contains three bands at 5.8 eV (band I), 6.6 eV (band II), and 7.7 eV (band III). From the analysis of the band structure, the luminescence excitation band I at 5.8 eV can be interpreted as the excitation of the molecular exciton associated with the SO₄²⁻ $\rightarrow$ 4sK⁺ transition. Band II can be attributed to the fundamental absorption edge formed by exciton transitions. Peak III is associated with the transition from the second oxygen subband to the 4s-states of potassium. Excitation of the molecular complex SO₄²⁻ during band-band excitation can be considered as the recombination of electrons of the conduction band with a hole localized at SO₄⁻. The band gap E_g estimated from the luminescence excitation spectra, taking into account the exciton binding energy, is close to ~ 7 eV, which is consistent with the theoretical results.

Acknowledgments: Results presented in this work have been obtained with the support of the Project of Young Scientists 0123U100599 of the Ministry of Education and Science of Ukraine.

1. M.Ya. Rudysh, V.Yo. Stadnyk, P.A. Shchepanskyi, R.S. Brezvin, J. Jedryka, I.V. Kityk, Physica B: Condensed Matter 580, 411919(2020).
2. M. Mutailipu, S. Pan, Sci. China Mater. 67, 1004(2024).
3. Y. Song, Y. Hongway, L. Bingxuan, L. Xiaoqi, Z. Yang, L. Yanqiang, H. Chao, Z. Ge, L. Junhua, Z. Sengen, Advanced Functional Materials 34, 2310407 (2024).
4. V.Yu. Kurlyak, Ivan Franko State University of Lviv, 1990.
5. B. John, A. Mo, Acta Cryst. 28, 2845 (1972).
6. M.T. Robinson, J. Phys. Chem. 62, 925 (1958).
7. B. Andriyevsky, M. Jaskólski, V.Y. Stadnyk, M.O. Romanyuk, Z.O. Kashuba, M.M. Romanyuk, Computational Materials Science, 79, 442 (2013).
8. V.M. Gaba, V.I. Stadnyk, O.S. Kushnir, O.Z. Chizh, Opt. Spectrosc. 110, 967 (2011).

УДК 535

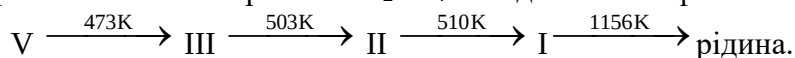
ЕЛЕКТРОННА БУДОВА І РЕФРАКТИВНІ ПАРАМЕТРИ КРИСТАЛА Na₂SO₄
М.Я. Рудиш¹, Р.С. Брезвін¹, Л.-Д. Т. Карплюк¹, А.О. Федорчук², А.І. Кашуба³,
В.М. Кордан¹, А.М. Ларченко¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія 8, м. Львів,
Україна, 79000, rudysh.myron@gmail.com

²Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій
імені Степана Гжицького, вул. Пекарська, 50, Львів, Україна, 79010

³Національний університет «Львівська Політехніка», вул. Степана Бандери, 12, Львів,
Україна, 79000

Сульфат натрію (Na₂SO₄) є представником групи кристалів A₂BX₄, де X = Li, K, Na, Rb, Cs, NH₄, BX₄ = SO₄, SeO₄, PO₄, BeF₄, ZnCl₄. Він є типовим діелектриком, з широкою забороненою зоною. Кристал Na₂SO₄ володіє низкою фазових переходів



Симетрії відповідних фаз є такими: V – Fddd (D_{2h}^{24} , Z = 8); III – Cmc (D_{2h}^{17} , Z = 4); II – Pbnm (або Pnam, D_{2h}^{16} , Z = 4); та I – P6₃/mmc. Ця сполука викликає інтерес у зв'язку з перспективою її використання в суперконденсаторах [1] для ефективного накопичення та зберігання енергії. Також активно вивчаються властивості матеріалів, посилені

наночастинками [2]. Одночасно проводяться дослідження з вивчення люмінесцентних властивостей чистих і домішкових кристалів Na_2SO_4 , а також їх композитів різного складу [3].

На сьогодні властивості кристалів сульфату натрію мало досліджені. Автори часто обмежуються вивченням властивостей розчину сполуки, тоді як кристалічним зразкам увага не приділяється. Важливими є дослідження властивостей сполуки у формі кристала, оскільки його анізотропія може бути ключовим фактором для можливості практичного використання.

У роботі проводиться експериментально-теоретичне дослідження структури, електронної структури та оптичних спектрів кристала Na_2SO_4 за кімнатної температури.

Кристали Na_2SO_4 отримувались з використанням методу випаровування розчинника з водного розчину. Вихідними компонентами були хімічно чисті солі Na_2SO_4 , що розчинялись в демінералізованій воді. Солі розчинялись у воді, після чого отриманий розчин фільтрувався. Після отримання насиченого розчину на дні кристалізатора отримувались затравки, з яких відбувався ріст кристалів (рис. 1 а).

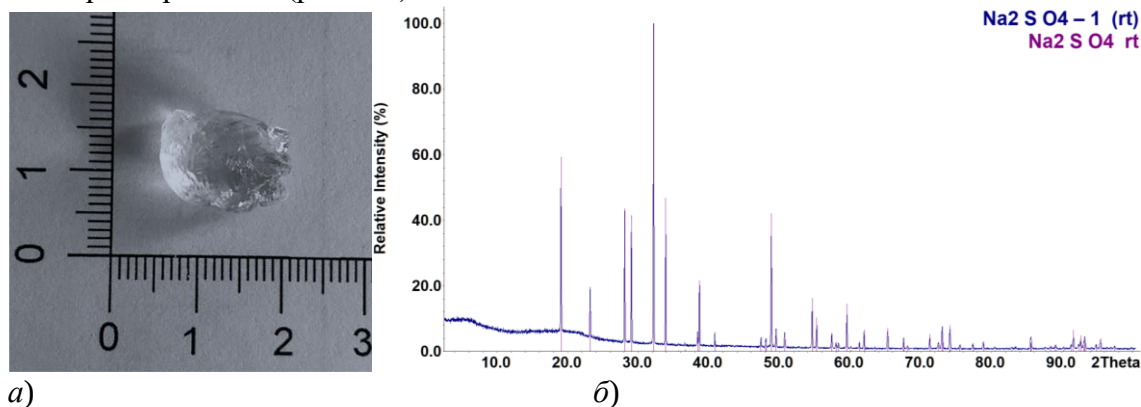


Рис. 1. Вигляд кристала Na_2SO_4 вирощеного методом випаровування розчинника (а) та записана для кристала дифрактограма (б).

Структура кристалічної ґратки досліджувалась з використанням X-променевого дифрактометра. Вигляд дифрактограми отриманої для кристала Na_2SO_4 зображено на рис. 1. б. Виявлено, що синтезований зразок є однофазний. Сполука Na_2SO_4 є з просторовою групою $Fddd$, з власним структурним типом. Уточнені параметри елементарної комірки $a = 5,8568(4)$, $b = 9,809(1)$, $c = 12,2957(7)$ Å, об'єм $V = 706,52$ Å³.

У роботі вперше проведено теоретичні дослідження зонно-енергетичної структури кристала Na_2SO_4 з використанням першопринципного підходу на базі теорії функціоналу густини (density functional theory – DFT). Отримано зонно-енергетичну діаграму кристала з використанням GGA функціоналу. Показано, що кристал Na_2SO_4 володіє забороненою зоною прямого типу. Вершина валентної зони та дно зони провідності знаходяться в центрі зони Бріллюена (точка Г). Теоретичне значення ширини забороненої зони становить 4,95 еВ. Що узгоджується з результатами розрахунку. Зонна структура характеризується строкатою структурою, що для рівнів валентної зони утворена низкою вузьких підрівнів, що слабо залежать від k -вектора. Рівні зони провідності мають сильнішу залежність від хвильового вектора, що зумовлено відносно слабшою взаємодією електронів з ядром атомів. Порівняно з наявними експериментальними даними, отримане значення E_g є дещо заниженим, що узгоджується з відомими особливостями узагальненого градієнтного наближення [4-6]. Показано, що вершина валентної зони кристала Na_2SO_4 утворена p -станами кисню, що є типовим для кристалів групи $A_2\text{BX}_4$, де аніон $\text{BX}_4 = \text{SO}_4, \text{SeO}_4$. Дно зони провідності формується s -станами катіона Na^+ . З аналізу проведеного за допомогою зарядів Міллікена з'ясовано, що кристал містить змішаний іонно-ковалентний тип хімічного зв'язку. Всередині тетраedrів SO_4 присутній направлений ковалентний зв'язок, що характеризується суттєвим перерозподілом електронної густини. Катіони Na^+ та аніонні комплекси SO_4^{2-} взаємодіють між собою через іонний зв'язок.

Розраховано оптичні спектри кристала Na_2SO_4 з використанням матричних елементів дипольних переходів. Отримано спектр дійсної та уявної частин діелектричної функції $\epsilon_1(\omega)$ та $\epsilon_2(\omega)$. Показано, що в області малих енергій діелектрична функція плавно зростає. Зі спектрів діелектричної функції отримано спектр відбивання $R(\omega)$, показник заломлення $n(\omega)$ та коефіцієнт поглинання $\alpha(\omega)$.

За допомогою спектрофотометра СФ-46 проведено дослідження спектрів пропускання кристала Na_2SO_4 . У якості джерела світла використано лампу ДДС-30. З використанням спектроскопічних методів проведено дослідження двоприменезаломлюючих властивостей кристала Na_2SO_4 в оптичній ділянці спектру за кімнатної температури.

Подяки: Результати, представлені в цій роботі, отримані за підтримки Міністерства освіти і науки України в рамках проєкту молодих вчених 0123U100599 «Нові моно-, полі-, нанокристалічні матеріали подвійного призначення для акумуляторів, накопичувачів водню, сенсорної техніки та електроніки».

1. S. Zhu, Y. Sun, K. Li, Y. Dang, X. Guan, Journal of Power Sources, 597, 234150 (2024).
2. W. Huang, G. Zhou Journal of Molecular Liquids, 397, 124157 (2024).
3. F. Omer, Y. Abdulla, A. Noh, Brazilian Journal of Radiation Sciences, 12, 1, e2322, (2024).
4. M. Ya. Rudysh, Materials Science in Semiconductor Processing, 148, 106814 (2022).
5. M. Ya. Rudysh, I. A. Pryshko, P. A. Shchepansky, V. Yo. Stadnyk, R. S. Brezvin, Z. O. Kogut, Optik. 269, 169875 (2022).
6. M.Ya Rudysh, M.G. Brik, V.Yo. Stadnyk, R.S. Brezvin, P.A. Shchepanskyi, A. Fedorchuk, O.Y. Khyzhun, I.V. Kityk, M. Piasecki, Physica B: Physics of Condensed Matter. 528, 37–46 (2018).

УДК 678.549

ВПЛИВ ПОПЕРЕДНЬОЇ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ КОМПОЗИЦІЙ НА СТРУКТУРУВАННЯ БІОКОМПОЗИТІВ

О.Л. Садова, В.П. Кашицький, М.І. Вишинський

Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75,
o.sadova@lntu.edu.ua

Для розробки біокомпозитних матеріалів найбільш широко використовуваними біополімерами є полі(молочна кислота) (PLA), ефіри целюлози, полігидроксикапролати (PHA) крохмаль [1]. Значний інтерес викликають біокомпозити на основі крохмального в'язучого та целюлозних волокон як екологічно чисті матеріали та біорозкладні відновлювані ресурси для сталого розвитку [2]. Целюлоза широко використовується в біокомпозитах завдяки доступності сировини, біосумісності та екологічності. Структура целюлози є високоорганізованою, із складеними ланцюгами, які забезпечують стабільність і міцність композитного матеріалу [3]. Основними проблемами широкого впровадження композитів на основі крохмального в'язучого є короткотривала стабільність, низька водостійкість, погіршення механічних властивостей через поглинання вологи та відносно швидкий біорозклад [4]. Використання вторинних сільськогосподарських продуктів, зокрема соломи, може підвищити конструкційну міцність біокомпозитів на основі природних матриць і одночасно зменшити негативний вплив на навколишнє середовище [5].

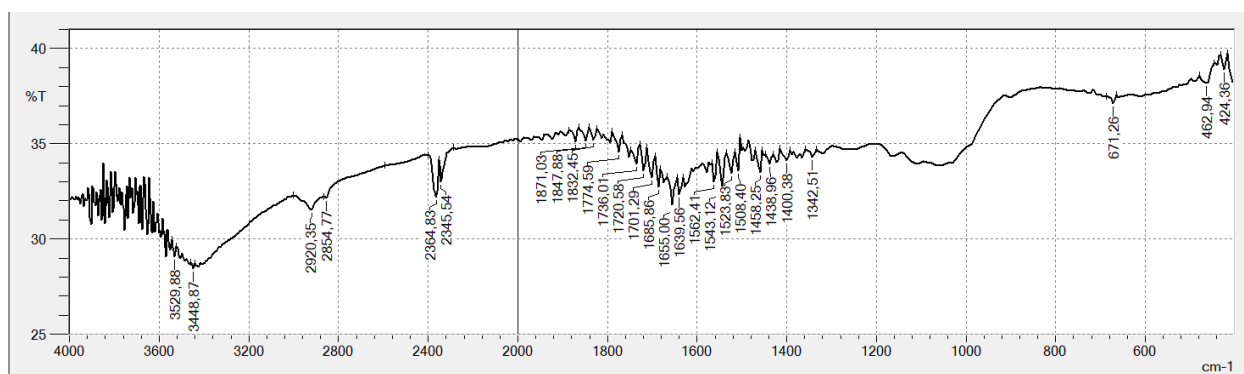
В якості наповнювача для формування біокомпозитів використано подрібнені стебла соломи фракцією 0,7 мм. Вміст наповнювача становив 150 мас. ч. В якості матриці використано водний розчин кісткового клею. До попередньо підсушеного наповнювача додавали водний розчин кісткового клею і змішували. Окремо дозували 11 г композиції [6] і поміщали в сушильну шафу за температури 50 °С з метою видалення надлишкової вологи, яка потрапляє в матеріал. Біокомпозитні зразки отримували методом пресування. Термічну

обробку біокомпозитів проводили у формі, яка полягала у витримці протягом 2 год за температури 150 °С. Охолодження зразків проводили у формі на спокійному повітрі.

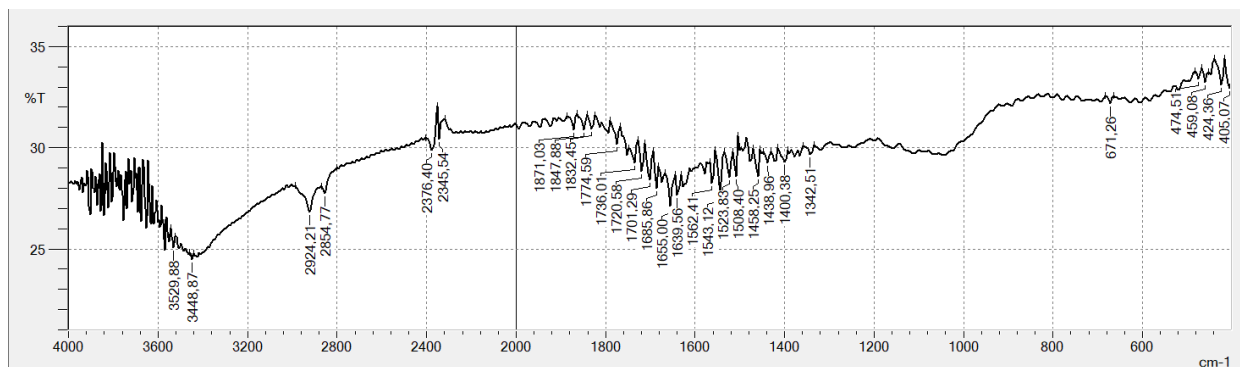
На ІЧ-спектрограмах біокомпозитів (рис. 1) виявлено складні спектри смуг поглинання в області частот 1300-2000 cm^{-1} , що вказує на високий ступінь зшивання полімерної матриці з наповнювачем. В даній області для біокомпозиту без підсушування композиції зафіксовані наступні смуги поглинання (рис. 1, а): за частот 1458,25 cm^{-1} (оптична густина $D=0,475$), 1543,12 cm^{-1} (оптична густина $D=0,486$), 1655,00 cm^{-1} (оптична густина $D=0,498$), 1701,29 cm^{-1} (оптична густина $D=0,479$), 1774,59 cm^{-1} (оптична густина $D=0,461$).

Для біокомпозитів із підсушування композиції найбільш виражені смуги поглинання на ІЧ-спектрограмах (рис. 1, б) за аналогічних частот: 1458,25 cm^{-1} (оптична густина $D=0,544$), 1543,12 cm^{-1} (оптична густина $D=0,558$), 1655,00 cm^{-1} (оптична густина $D=0,567$, півширина $b=11,58 \text{ cm}^{-1}$), 1701,29 cm^{-1} (оптична густина $D=0,547$), 1774,59 cm^{-1} (оптична густина $D=0,520$). Біокомпозитні матеріали без підсушування композиції характеризуються меншими оптичними густинами та більшими площами піків. Це вказує на більш повне зшивання біополімерної матриці з наповнювачем для біокомпозитів з попереднім підсушуванням композиції порівняно з біокомпозитами без підсушування композиції, що підтверджується отриманими вищими результатами міцності на стискання для даних матеріалів. Отримані смуги поглинання свідчать про присутність деформаційних коливань О-Н-, С-Н, N-H-груп та валентних коливань подвійних зв'язків -C=C-, -C=O-, -N=O та -C=N, кількість яких зростає під час термічної обробки.

В області вищих частот зафіксовані смуги поглинання для біокомпозитів без підсушування композиції за частот 2345,54 cm^{-1} (оптична густина $D=0,481$), 2364,83 cm^{-1} (оптична густина $D=0,492$), 2920,35 cm^{-1} (оптична густина $D=0,501$). Для біокомпозитів з підсушуванням композиції виявлено зміщення смуг поглинання в даній області: за частот 2376,40 cm^{-1} і 2924,21 cm^{-1} , які характеризується вищими оптичними густинами $D=0,524$ і $D=0,571$ та меншими площами піків. Виявлені смуги коливань за даних частот вказують на наявність валентних коливань -C≡C- та -C≡N-, а також метиленової групи CH_2 . Це вказує на активізацію процесів зшивання між полімерним в'язучим та наповнювачем, а також наявність непрореагованих функціональних груп у біокомпозиті з підсушуванням композиції внаслідок недостатнього змочування біополімерним в'язучим поверхонь волокнистого наповнювача.



а



б

Рис. 1. ІЧ-спектрограми біокomпозитів без підсушування (а) та з підсушуванням (б) композиції до втрати вологи 25% за масою

Біокomпозитні матеріали без підсушування композиції характеризуються меншими оптичними густинами та півшириною піків, що вказує на більш повне зшивання біополімерної матриці з наповнювачем для біокomпозитів з попереднім підсушуванням композиції порівняно з біокomпозитами без підсушування композиції.

1. Akter M., Uddin Md.H., Tania I.Sh. Biocomposites based on natural fibers and polymers: A review on properties and potential applications. 41(17-18). DOI: [10.1177/07316844211070](https://doi.org/10.1177/07316844211070)
2. Boudjema H.L., Bendaikha H. Composite materials derived from biodegradable starch polymer and Atriplex halimus fibers. e-Polymers. 15(6). 2015. DOI:[10.1515/epoly-2015-0118](https://doi.org/10.1515/epoly-2015-0118)
3. Gurunathan T., Mohanty S., Nayak S.K. A review of the recent developments in biocomposites based on natural fibres and their application perspectives. Composites Part A Applied Science and Manufacturing. 77. 2015. 1–25. DOI:[10.1016/j.compositesa.2015.06.007](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2015.06.007)
4. Satyanarayana K.G., Arizaga G.C., Wypych F. Biodegradable composites based on lignocellulosic fibers – An overview, Prog. Polym. Sci., 367(1). 2009. pp. 204-210.
5. Jerman M., Dušek J., Böhm M., Černý R. Composite material based on rape straw and environmentally friendly adhesive. AIP Conference Proceedings 2343(1), 2021. DOI:10.1063/5.0047731
6. Кашицький В.П., Садова О.Л., Вишинський М.І., Мисковець С.В. Формування глютинових біокomпозитних матеріалів, наповнених подрібненими стеблами зернових культур / Вісник Вінницького політехнічного інституту. 1(166). Вінниця. 2023. С. 65-71.

RELEVANCE OF MODIFICATION OF MATERIALS FOR MODERN ELECTRONICS BY PROTON BEAMS

Ya.A. Saidimov¹, R.F. Rumi², F.B. Umarov³

¹Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Head of Laboratory,

²Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Head of Laboratory, ³Basic Doctoral Candidate.

^{1,2,3}Research Institute of Semiconductor Physics and Microelectronics at the National University of Uzbekistan named after M. Ulugbek (Tashkent), Uzbekistan.

"Research conducted in recent years indicates the potential of irradiating silicon with light ions (hydrogen, helium) to form special properties of the material that are unattainable by traditional methods [1]. Such silicon processing is promising for the development of a number of semiconductor technologies, in particular, in the manufacture of PIN photodiodes with improved characteristics [2].

Based on the results of studies [3-6], carried out, among others, by the authors of this work [7-12], it can be concluded that the main advantage of proton implantation in silicon is the possibility of forming “damaged” layers. A feature of such layers is the existence of a large number of structural defects created by proton irradiation and subsequent heat treatment. Depending on the irradiation modes, temperature and annealing time, it is possible to create areas saturated with defects of various types, such as clusters of radiation-induced point defects (removable by subsequent heat treatment); sets of defects and micropores filled with hydrogen, remaining in the crystal after heat treatment; large hydrogen bubbles leading to erosion of the crystal surface, which manifests itself in the form of peeling of the surface layer at a depth approximately corresponding to the projective range of the implanted particles (in this case, protons).

The presence of each of the named structural defects can be used in technological processes [1, 2, 13].

At present, several directions of practical use of the properties of damaged layers created by proton irradiation and subsequent thermal treatment are being formed in the field of semiconductor physics. These are gettering of recombination impurities, separation of silicon plates of n and p conductivity types connected by diffusion welding (Smart cut technology), increasing the adhesion of films deposited on the surface of silicon plates and increasing the efficiency of photoconverters.

To study the effect of proton irradiation on the properties of single-crystal silicon, samples of KEF-40 n-type silicon grown by the Czochralski method with a specific resistance of 38-42 Ohm cm were irradiated. Irradiation was performed on an EG-2 electrostatic accelerator. The proton energy was 350, 500 and 650 keV, the irradiation time was from 15 minutes to 75 minutes with a step of 15 minutes.

After irradiation, the main electrophysical parameters of the irradiated samples were measured. Analysis of the measurement results before and after irradiation show that the specific resistance, as well as the mobility and concentration of the main charge carriers, underwent little change. But the study of the surface morphology, using a scanning electron microscope SEM EVO MA 10, indicate structural changes in the area of proton beam impact. Which allows us to draw a conclusion about local changes in sample parameters.

1. V. E. Asadchikov, I. G. Dyachkova, D. A. Zolotov, Yu. S. Krivonosov, V. T. Bublik, A. I. Shikhov. On the relationship between proton irradiation and heat treatment of single-crystal silicon and its structure. News of universities. Materials of electronic engineering. 2019. Vol. 22, No. 1 ISSN 1609–3577. -P. 18-26.
2. Gubarev V., Semenov A., Surma A., Stolbunov V. Proton irradiation technology and the possibilities of its application to improve the characteristics of power diodes and thyristors // Power Electronics. 2011, No. 5, pp. 108–111.
3. Smirnov I. S., Soloviev G. G., Novoselova E. G., Gurinov D. E. Formation of layers with special properties in silicon by proton implantation and heat treatment // VII International conference "Radiation physics of solids". Moscow: MGIEP, 1997, pp. 230-231.
4. Irmscher K., Klose H., Maass K. Hydrogen-related deep levels in proton-bombarded silicon // J. Phys. C: Solid State Phys. 1984 V. 17, N 35 P. 6317-6329. DOI: 10.1088/0022-3719/17/35/007
5. Kirnstötter S., Faccinelli M., Jelinek M., Schustereder W., Laven JG, Schulze HJ, Hadley P. Multiple proton implantations into silicon: A combined EBIC and SRP study // Solid State Phenomena. 2014 V. 205-206. P. 311-316. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.205-206.311
6. Bezrodnykh I. P., Tyutnev A. P., Semenov V. T. Radiation effects in space. Part 3. The influence of ionizing radiation on electronic products. Moscow: JSC "VNIIEP Corporation", 2017 64 p.
7. Dyachkova I. G., Novoselova E. G., Smirnov I. S. Implantation of silicon wafers with protons under conditions of a mechanically stressed surface layer// XXIV International Conference "Radiation Physics of Solids". Moscow: FGBNU "Research Institute of PMT", 2014, pp. 512-518.

8. Dyachkova I. G., Novoselova E. G., Smirnov I. S. Effect of temperature on the formation of damaged layers in silicon under proton irradiation // XXV International Conference "Radiation Physics of Solids". Moscow: FGBNU "Research Institute of PMT", 2015, pp. 539-549.
9. Smirnov I. S., Novoselova E. G., Dyachkova I. G. Effect of temperature on the formation of defects in silicon crystals during proton implantation // Seventh International Scientific Seminar and Fifth International Youth Scientific School-Seminar "Modern Methods of Diffraction Data Analysis and Current Problems of X-ray Optics". V. Novgorod, 2015, pp. 222-225.
10. Dyachkova I. G., Novoselova E. G., Smirnov I. S. Transformation of radiation defects in proton-implanted silicon during low-temperature heat treatment // XXIV International Conference "Radiation Physics of Solids". Moscow: FGBNU "Research Institute of PMT", 2016, pp. 362-370.
11. Dyachkova I. G., Novoselova E. G., Smirnov I. S., Monakhov I. S. Effect of mechanical stresses on defect formation in silicon under proton irradiation // 12th International Conference "Interaction of Radiation with Solids". Minsk, 2017, pp. 140-141.
12. Dyachkova IG, Novoselova EG, Smirnov IS On the implantation of protons into silicon plates in the case of a mechanically stressed surface layer // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2018 V. 12, N 3 P. 613—618. DOI: 10.1134/S1027451018030278
13. Bruel M. Silicon on insulator material technology // Electronics Lett. 1995 V. 31, N 14 P. 1201-1202. DOI: 10.1049/ el:19950805

УДК 541.123: 546.[683+48+28]’23

ПОЛІТЕРМІЧНІ ПЕРЕРІЗИ СИСТЕМИ $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{SiSe}_2$

А.О. Селезень ¹, Л.Д. Гулай ², Л.В. Піскач ²

¹Національний університет водного господарства та природокористування,
Україна, 33000, м. Рівне, вул. Соборна, 11;

²Волинський національний університет імені Лесі Українки,
Україна, 43025, м. Луцьк, просп. Волі, 13
e-mail: a.o.selezen@nuwm.edu.ua

При вивченні квазіпотрійної системи $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}-\text{SiSe}_2$ при 570 К [1] підтверджено утворення бінарних та потрійних сполук, що кристалізуються у ПГ $P4/ncc$ (Tl_2Se), $F-43m$ (CdSe), $P2_1/c$ (SiSe_2), Cc (Tl_4SiSe_4), $P-1$ (Tl_2SiSe_3) та (Cd_4SiSe_6) і встановлено утворення трьох нових сполук: тернарної $\text{Tl}_2\text{Si}_2\text{Se}_5$ та двох тетрарних $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4$, $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$. Тетрарна сполука $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4$ утворюється на перерізі $\text{Tl}_2\text{SiSe}_3-\text{CdSe}$, інша $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$ – на перерізі $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4-\text{SiSe}_2$. Ізотермічний переріз даної системи при температурі відпалу 570 К характеризується наявністю дев'яти однофазних полів, що відповідають α , β , γ , δ , ε , η , ζ , σ , θ -твердим розчинам на основі Tl_2Se , CdSe , SiSe_2 , Tl_4SiSe_4 , Tl_2SiSe_3 , $\text{Tl}_2\text{Si}_2\text{Se}_5$, Cd_4SiSe_6 , $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4$ та $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$, розділених сімнадцятьма двофазними полями, які утворюють дев'ять трифазних (α - $\text{Tl}_2\text{Se}-\beta$ - $\text{CdSe}-\delta$ - Tl_4SiSe_4 , δ - $\text{Tl}_4\text{SiSe}_4-\beta$ - $\text{CdSe}-\sigma$ - $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4$, δ - $\text{Tl}_4\text{SiSe}_4-\sigma$ - $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4-\varepsilon$ - Tl_2SiSe_3 , ε - $\text{Tl}_2\text{SiSe}_3-\sigma$ - $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4-\theta$ - $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$, ε - $\text{Tl}_2\text{SiSe}_3-\theta$ - $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8-\eta$ - $\text{Tl}_2\text{Si}_2\text{Se}_5$, η - $\text{Tl}_2\text{Si}_2\text{Se}_5-\theta$ - $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8-\gamma$ - SiSe_2 , γ - $\text{SiSe}_2-\theta$ - $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8-\zeta$ - Cd_4SiSe_6 , ζ - $\text{Cd}_4\text{SiSe}_6-\theta$ - $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8-\beta$ - CdSe , β - $\text{CdSe}-\theta$ - $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8-\sigma$ - $\text{Tl}_2\text{CdSiSe}_4$) полів. Розчинність на основі CdSe становить до 5 мол. %, а на основі інших сполук – менше 3 мол. %.

Через неоднозначність результатів щодо рівноваг між Tl_2Se і CdSe проведено дослідження фізико-хімічної взаємодії по перерізу $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{CdSe}$ [2]. Діаграма стану системи відноситься до V типу діаграм стану за класифікацією Розебома. Бінарний евтектичний нонваріантний процес $L_e \leftrightarrow \alpha + \beta$ проходить при 622 К; склад евтектичної точки становить 13 мол. % CdSe . Утворення сполуки складу $\text{Tl}_{16}\text{Cd}_3\text{Se}_{11}$ [3] не підтвердилось. Протяжності граничних α -твердих розчинів на основі сполуки Tl_2Se (III $P4/ncc$) та β – на основі сполуки

CdSe (ПГ Р63тс), що були досліджені при температурі гомогенізуючого відпалу (570 K), становлять у межах до 7 та 3 мол. % відповідно.

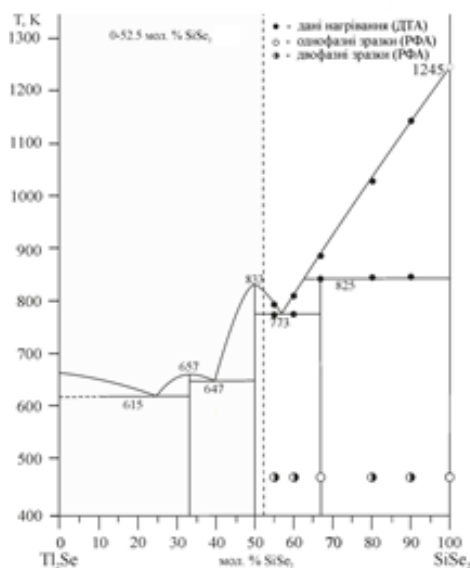


Рис. 1. Переріз $Tl_2Se-SiSe_2$ (0-52,5 мол. % $SiSe_2$ [4], 55-100 мол. % $SiSe_2$ [1])

Політермічний переріз $Tl_2Se-SiSe_2$ побудовано в роботі [4] до 52,5 мол. % $SiSe_2$, де наведено дані про утворення двох сполук складів $\delta-Tl_4SiSe_4$ та $\varepsilon-Tl_2SiSe_3$. Нами досліджено [1] фазові рівноваги в цій системі в інтервалі 55-100 мол. % $SiSe_2$ та встановлено утворення тернарної сполуки складу $\eta-Tl_2Si_2Se_5$ за перитектичною реакцією $L + \gamma-SiSe_2 \leftrightarrow \eta-Tl_2Si_2Se_5$ при 825 K (рис. 1). Склад перитектичної точки становить 63 мол. % $SiSe_2$. Лінії первинної кристалізації сполук $\varepsilon-Tl_2SiSe_3$ та $\eta-Tl_2Si_2Se_5$ перетинаються в евтектичній точці складу 57 мол. % $SiSe_2$.

Побудовано діаграму стану системи Tl_4SiSe_4-CdSe [5], котра є квазібінарною евтектичного типу з координатами евтектичної точки 7 мол. % $CdSe$, 626 K. Розчинність на основі вихідних компонентів системи є незначна (до 3 мол. %).

Досліджено діаграму стану системи Tl_2SiSe_3-CdSe [1]. Встановлено утворення нової тетрарної сполуки $Tl_2CdSiSe_4$ при молярному співвідношенні сполук $\varepsilon-Tl_2SiSe_3$ та $\beta-CdSe$ 1:1. Тетрарна сполука $Tl_2CdSiSe_4$ утворюється інконгруентно за реакцією $L + \beta-CdSe \leftrightarrow \sigma-Tl_2CdSiSe_4$ при температурі 728 K. Склад перитектичної точки становить 11 мол. % $CdSe$. Розчинність на основі вихідних компонентів є незначною. Склад евтектичної точки становить 7 мол. % $CdSe$ при 696 K ($L_e \leftrightarrow \beta-CdSe + \sigma-Tl_2CdSiSe_4$). Рентгенівським методом порошкової дифракції досліджено кристалічну структуру тетрарної сполуки $Tl_2CdSiSe_4$ (ПГ I-42m (№ 121); $a=0,8020(2)$, $c=0,6646(2)$ нм) [6].

Інша тетрарної сполуки $Tl_2CdSi_3Se_8$, що утворюється на перерізі $Tl_2CdSiSe_4-SiSe_2$ є ізоструктурною до $Tl_2CdGe_3Se_8$ та кристалізується у СТ $Cs_2CdGe_3Se_8$ [7] (ПГ $P2_12_12_1$ (№19); $a=0,7487(1)$, $b=1,2117(3)$, $c=1,7137(3)$ нм) [1]. Рентгенівська спостережувана, розрахована та різницева між ними для сполук $Tl_2CdSi(Ge)_3Se_8$ показані на рис. 2. Проведений ДТА аналіз

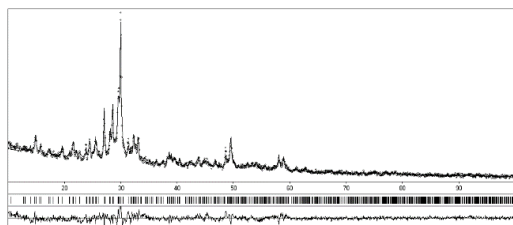


Рис. 2. Рентгенівська спостережувана, розрахована та різницева між ними для сполуки $Tl_2CdSi_3Se_8$

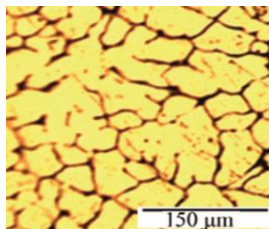


Рис. 3. Мікроструктура зразка складу сполуки $Tl_2CdSi_3Se_8$

для зразка складу $Tl_2CdSi_3Se_8$ вказує, що для даної сполуки характерний конгруентний тип плавлення при 887 K. Зразок сполуки $Tl_2CdSi_3Se_8$ є прозорим однофазним сплавом жовтого кольору (рис. 3).

За участі цієї сполуки побудовано два перерізи. Політермічний переріз $Tl_2SiSe_3-Tl_2CdSi_3Se_8$ є квазібінарним евтектичного типу. Координати евтектичної точки становлять 25 мол. %, 698 K, які встановлено екстраполяцією двох ліній ліквідусу, які відповідають первинній кристалізації твердих розчинів на основі $\varepsilon-Tl_2SiSe_3$ та $\theta-Tl_2CdSi_3Se_8$ ($L_e \leftrightarrow \varepsilon-$

$\text{Tl}_2\text{SiSe}_3+\theta\text{-Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$). Проведений ДТА аналіз для зразка складу $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$ вказує, що для даної сполуки характерний конгруентний тип плавлення при 887 К. Зразок сполуки $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$ є прозорим однофазним сплавом жовтого кольору (рис.2).

Політермічний переріз $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8\text{--CdSe}$ є також квазібінарним евтектичного типу та характеризується проходженням при 858 К відповідного нонваріантного процесу ($\text{L}_e \leftrightarrow \theta\text{-Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8 + \beta\text{-CdSe}$). У підсолідусній області у рівновазі перебувають двофазні θ - та β -тверді розчини на основі $\text{Tl}_2\text{CdSi}_3\text{Se}_8$ та CdSe.

1. Селезень А. О. Фазові рівноваги в системах $\text{Tl}_2\text{Se--CdSe--Si}(\text{Ge, Sn})\text{Se}_2$ та споріднених, кристалічна структура і властивості проміжних фаз : дис. ... доктора філософії : 102 Хімія. Луцьк, 2023. 176 с.

2. Селезень А.О., Піскач Л.В. Фізико-хімічна взаємодія в системах $\text{Tl}_2\text{Se--Zn}(\text{Cd})\text{Se}$. VII Всеукраїнська наукова конференція «актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи. Житомир, 19 квітня 2023, с. 137-138.

3. Mucha I., Wiglus K. Phase studies on the quasi-binary thallium(I) selenide–cadmium selenide system. *Thermochim. Acta*, 2011, 526(1),. 107-110.

4. Lazarev V.B., Peresh E.Yu., Starosta V.Y. Fazovyie ravnovesiya v sistemakh $\text{Tl}_2\text{S}(\text{Se})\text{--SiS}_2(\text{Se}_2)$. *Zhurn. neorh. khymii*. 1983, 28(8), 2097-2099.

5. Селезень А., Піскач Л. Взаємодія по перерізах $\text{Tl}_4\text{Si}(\text{Ge,Sn})\text{Se}_4\text{--CdSe}$. Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології: тези доповідей III Міжнародної наукової конференції (м. Луцьк, 1-3 червня 2023 р.) / м. Луцьк: Терен, с. 105-106.

6. Selezenev A.O., Olekseyuk I.D., Myronchuk G.L., Smitiukh O.V., Piskach L.V. Synthesis and structure of the new semiconductor compounds $\text{Tl}_2\text{B}^{\text{II}}\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_4$ ($\text{B}^{\text{II}}\text{--Cd, Hg}$; $\text{D}^{\text{IV}}\text{--Si, Ge}$; X--Se, Te) and isothermal sections of the $\text{Tl}_2\text{Se--CdSe--Ge}(\text{Sn})\text{Se}_2$ systems at 570 K. *J. Solid State Chem.* 2020, 289, 121422 (7 p.). <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2020.121422>

7. Morris, C.D.; Li, H.; Jin, H.; Malliakas, C.D.; Peters, J.A.; Trikalitis, P.N.; Kanatzidis, M.G. $\text{Cs}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}^{\text{IV}}_3\text{Q}_8$ (Q = S, Se, Te): An Extensive Family of Layered Semiconductors with Diverse Band Gaps. *Chem. Mater.* 2013, 25(16), 3344-3356. <http://dx.doi.org/10.1021/cm401817r>

УДК 544.344.3:546.22/.23:546.[57+289+814+19+86+87]

ФІЗИКО-ХІМІЧНА ВЗАЄМОДІЯ У СИСТЕМАХ

$\text{AgC}^{\text{III}}\text{X}_2\text{--Ag}_8\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_6$ (де $\text{C}^{\text{III}}\text{--As, Sb, Bi}$, $\text{D}^{\text{IV}}\text{--Ge, Sn}$, X--S, Se)

В.О. Семенюк^{1,2}, Н.М. Кньовець¹, І. М. Савчук¹, О.С. Климович², Л.В. Піскач¹

¹Волинський національний університет імені Лесі Українки,
просп. Волі, 13, 43000, м. Луцьк, Україна

²Волинський НДЕКЦ МВС, вул. Винниченка, 43, 43006, м. Луцьк, Україна

Важливе місце для оптоелектроніки, акустооптики та нелінійної оптики займають складні халькогеніди елементів Ib, IVa та Va груп Періодичної системи. Пошук перспективних сполук з високоефективними термоелектричними властивостями, які дозволять замінити традиційні термоелектричні матеріали на основі токсичного свинцю і малопоширеного телуру, триває постійно. Сполуки типу $\text{A}^{\text{I}}\text{C}^{\text{III}}\text{X}^{\text{VI}}_2$, де $\text{A}^{\text{I}}\text{--Cu, Ag}$; $\text{C}^{\text{III}}\text{--As, Sb, Bi}$; X--S, Se володіють високим коефіцієнтом термоелектричної добротності. Сполука AgSbSe_2 знаходить використання у термоелектричних пристроях для високотемпературного інтервалу (400-900 К). Ag_8SnS_6 використовують як новий представник фотокаталітичних матеріалів, також пропонується використання нанокристалів Ag_8SnS_6 як ефективних ІЧ-поглиначів сонячного випромінювання. Це обумовлює інтерес до вивчення квазіпотрійних систем типу $\text{A}^{\text{I}}_2\text{X--C}^{\text{III}}_2\text{X}_3\text{--D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{A}^{\text{I}}\text{--Cu, Ag}$, $\text{C}^{\text{III}}\text{--As, Sb, Bi}$, $\text{D}^{\text{IV}}\text{--Ge, Sn}$, X--S, Se). Дослідження систем $\text{AgC}^{\text{III}}\text{X}_2\text{--Ag}_8\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_6$ є частиною систематичного вивчення взаємодій компонентів у вказаних системах.

Вихідними компонентами систем $\text{AgC}^{\text{III}}\text{X}_2 - \text{Ag}_8\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_6$ є тернарні сполуки AgAsS_2 , AgAsSe_2 , AgSbS_2 , AgSbSe_2 , AgBiS_2 , AgBiSe_2 та Ag_8GeS_6 , Ag_8GeSe_6 , Ag_8SnS_6 , Ag_8SnSe_6 , які конгруентно утворюються з розплаву в межах 683-1228 К; сполуки AgAsS_2 , AgSbS_2 , AgBiS_2 , AgBiSe_2 та Ag_8GeS_6 , Ag_8SnS_6 володіють поліморфними перетвореннями в межах 321-653 К. Сполуки кристалізуються: AgAsS_2 в ПГ $C2/c$, BTM-AgAsSe_2 в ПГ $R-3m$, HTM-AgAsSe_2 в тетрагональній сингонії, BTM-AgSbS_2 в ПГ $Fm-3m$, HTM-AgSbS_2 в ПГ $C2$, AgSbSe_2 в ПГ $Fm3m$, BTM-AgBiS_2 в ПГ $Fm-3m$, HTM-AgBiS_2 в гексагональній сингонії $\text{BTM-Ag}_8\text{GeSe}_6$ в ПГ $F-43m$, $\text{HTM-Ag}_8\text{GeSe}_6$ в ПГ $Pmn2_1$, Ag_8SnSe_6 в ПГ $Pmn2_1$, $\text{BTM-Ag}_8\text{GeS}_6$ в ПГ $F-43m$, $\text{HTM-Ag}_8\text{GeS}_6$ в ПГ $Pna2_1$, $\text{BTM-Ag}_8\text{SnS}_6$ в ПГ $F-43m$, $\text{HTM-Ag}_8\text{SnS}_6$ в ПГ $Pna2_1$.

Системи $\text{AgAsSe}_2 - \text{Ag}_8\text{Ge}(\text{Sn})\text{Se}_6$, які досліджувались авторами [1, 2] в усьому концентраційному та температурному інтервалах, є квазібінарними. За результатами ДТА, РФА та МСА були побудовані діаграми стану систем $\text{AgAsSe}_2 - \text{Ag}_8\text{Ge}(\text{Sn})\text{Se}_6$. Вони евтектичного типу. Координати евтектичних точок 98 мол. % $\text{AgAsSe}_2 - 2$ мол. % Ag_8GeSe_6 , 660 К [1] та 97 мол. % $\text{AgAsSe}_2 - 3$ мол. % Ag_8SnSe_6 , 650 К [2] відповідно. В обидвох системах має місце евтектоїдний процес, зумовлений переходом високотемпературної модифікації AgAsSe_2 в низькотемпературну, при 590 К [1] та 630 К [2] відповідно. Значної розчинності на основі вихідних сполук не спостерігається. Нових тетрарних фаз у досліджуваних системах не виявлено.

Взаємодія компонентів у системах $\text{AgSbSe}_2 - \text{Ag}_8\text{Ge}(\text{Sn})\text{Se}_6$ досліджувалась авторами [3] при температурі 570 К. Всі перерізи є квазібінарними. Тверді розчини на основі вихідних сполук при температурі дослідження є незначними. Нових тетрарних фаз у досліджуваних системах не виявлено.

Переріз $\text{AgSbS}_2 - \text{Ag}_8\text{SnS}_6$ [4] є квазібінарним. У цій системі при 920 К конгруентно утворюється тетрарна сполука $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{SnS}_{12}$ та володіє поліморфізмом з переходом при 646 К і є фазою змінного складу. Сполука $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{SnS}_{12}$ утворює евтектики з вихідними сульфідами AgSbS_2 та Ag_8SnS_6 , координати евтектичних точок: 12 мол. % Ag_8SnS_6 при 747 К та 30 мол. % Ag_8SnS_6 при 742 К [4-6].

В системах $\text{AgAsS}_2 - \text{Ag}_8\text{SnS}_6$ та $\text{AgSbS}_2 - \text{Ag}_8\text{GeS}_6$ також виявлено тетрарні сполуки складів $\text{Ag}_{11}\text{As}_3\text{SnS}_{12}$ та $\text{Ag}_{11}\text{Sb}_3\text{GeS}_{12}$; дані РФА представлено на рис. 1, 2. В системі $\text{AgAsS}_2 - \text{Ag}_8\text{GeS}_6$ нових сполук не виявлено (рис. 3) [4].

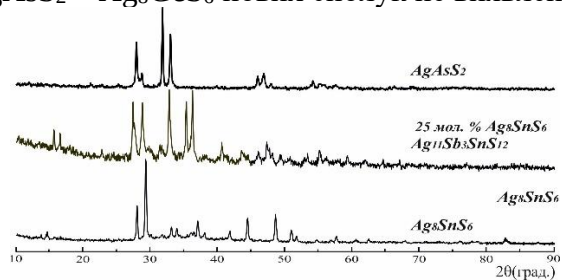


Рис. 1. Дифрактограми перерізу $\text{AgAsS}_2 - \text{Ag}_8\text{SnS}_6$

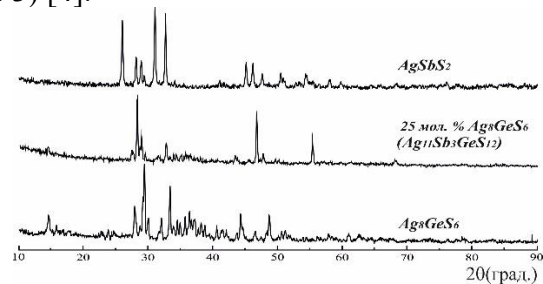


Рис. 2. Дифрактограми перерізу $\text{AgSbS}_2 - \text{Ag}_8\text{GeS}_6$

Згідно з нашими дослідженнями переріз $\text{AgBiS}_2 - \text{Ag}_8\text{GeS}_6$ є двофазною рівновагою (рис. 4) евтектичного типу [7]. Евтектична точка знаходиться при 970 К на складі 25 мол.% Ag_8GeS_6 . При 527 К протікає нонваріантний перитектоїдний процес, оскільки для Ag_8GeS_6 характерний фазовий перехід. На основі AgBiS_2 є область гомогенності до 10 мол. % при евтектичній температурі, а при температурі відпау розчинність зменшується до 5 мол. %.

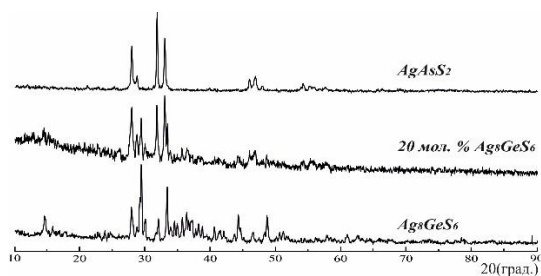


Рис. 3. Дифрактограми перерізу
AgAsS₂ – Ag₈GeS₆

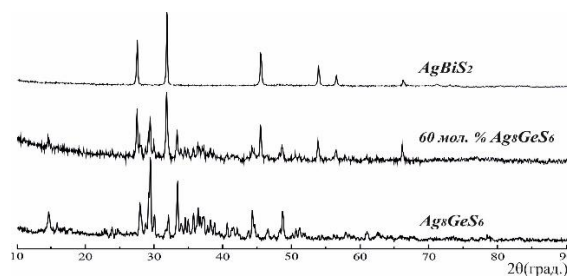


Рис. 4. Дифрактограми перерізу
AgBiS₂ – Ag₈GeS₆

Отже, в трьох представлених сульфідних системах утворюються однотипні сполуки: Ag₁₁As₃SnS₁₂, Ag₁₁Sb₃GeS₁₂ та Ag₁₁Sb₃SnS₁₂; в інших AgC^{III}X₂–Ag₈D^{IV}X₆ (де C^{III} – As, Sb, Bi, D^{IV} – Ge, Sn, X – S, Se) сполуки не утворюються, а досліджені діаграми є евтектичного типу.

1. Ivashchenko I. A., Klymovych O. S., Oleksyuk I. D., Gulay L. D., Halyan V. V., Strok O. M., Quasi-Ternary System Ag₂Se–GeSe₂–As₂Se₃ // J. Phase Equilib. Diffus. 43 (2022) 483–494, <https://doi.org/10.1007/s11669-022-00987-0>

2. Ivashchenko I. A., Klymovych O. S., Halyan V. V., Novosad O. V., Zelinskiy A. V., Pankevych V. Z., Piskach L. V., Gulay L. D., Matras-Postolek K. Physical properties of AgAs₃Se₅, Ag₂SnAs₆Se₁₂ (co-doped with Er³⁺, Nd³⁺) single crystals formed in the quasi-ternary system Ag₂Se–SnSe₂–As₂Se₃ // J. Solid State Chem. 332 (2024) 124581, <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2024.124581>

3. Остап'юк Т. А. Фазові рівноваги та властивості проміжних фаз у системах Cu(Ag)₂Se – Cd(Pb)Se – As(Sb)₂Se₃ і Cu₂Se – Ge(Sn)Se₂ – Sb₂Se₃ та споріднених // Автореф. дис. ... канд. хім. наук : 02.00.01. Львів, 2020. 25 с.

4. Березнюк О. П. Фазові рівноваги, склоутворення і властивості проміжних фаз у системах Cu(Ag)₂S – Ge(Sn)S₂ – As(Sb)₂S₃(P₂S₅) : дис. на здобуття ступеня доктора філософії зі спеціальності 102 – Хімія. Луцьк, 2023. 268 с.

5. Березнюк, О., Алрікік, М., Когут, Ю., Піскач, Л. Фазові рівноваги в системах Cu(Ag)₂S–Sb₂S₃–SnS₂ // Проблеми хімії та сталого розвитку, 4 (2022) 17–30, <https://doi.org/10.32782/pcsd-2022-4-2>

6. Berezniuk, O.P., Kogut, Y.M., Gulay, L.D., Piskach L.V. Phase Equilibria in the Ag₂S–Sb₂S₃–SnS₂ System and the Novel Quaternary Chalcogenide Ag₁₁Sb₃SnS₁₂ // J. Phase Equilib. Diffus. 45, (2024) 723–731, <https://doi.org/10.1007/s11669-024-01126-7>

7. Савчук І. М., Семенюк В. О., Кньовець А. М., Гулай Л. Д., Когут Ю. М., Піскач Л. В. Фазові рівноваги у квазібінарних системах AgSb(Bi)S₂–Ag₈GeS₆ // Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали: матеріали XII Міжнар. наук. конф. – (Луцьк – Світязь, 01–04 черв. 2024 р.) – Луцьк : Вежа-Друк, 2024. – С. 51-53.

УДК 544.023.2:722.5: 547. 551

ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ СПЕКТРІВ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ CrO₄²⁻ та Cr₂O₇²⁻. М.С. Сидорко, С.О. Палка, М.М. Яцишин, О.С. Тимошук

Львівський національний університет імені Івана Франка,
Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна, Mariia.Sydorko@lnu.edu.ua

Серед переліку важких металів значне місце по токсичності впливу на людський організм посідає хром, а саме його різновид Cr(VI) [1]. Відомо, що саме Cr(VI) є канцерогенною речовиною №1 у списку шкідливих речовин [2]. Залежно від рН водного розчину та загальної концентрації Cr(VI) може перебувати у різних оксидантних формах, як

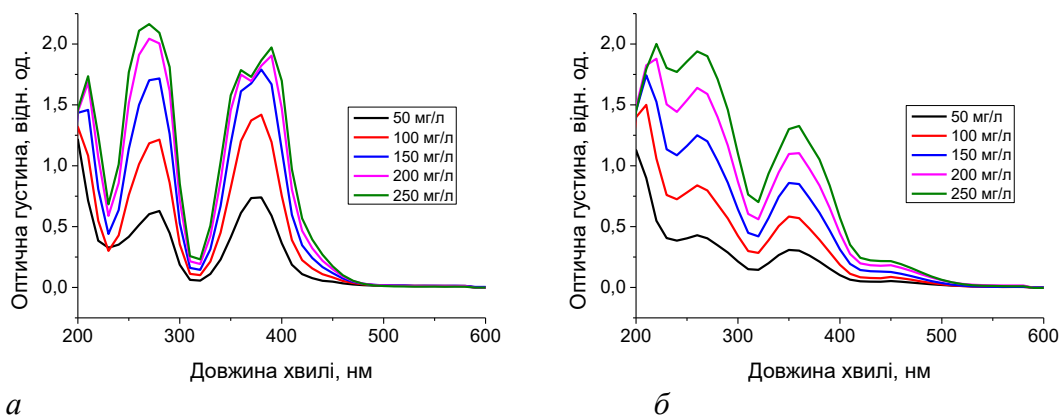
от хромату (CrO_4^{2-}), дихромату ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$) та гідроген хромату (HCrO_4^-) [3]. За концентрацій Cr(VI) від $0,05$ до 300 мг л^{-1} домінуючими є наступні види частинок: при $\text{pH} < 1$, H_2CrO_4 ; при $\text{pH} 1\text{--}6,5$, HCrO_4^- ; а при $\text{pH} > 6,5$, CrO_4^{2-} . За концентрації понад 300 мг л^{-1} Cr(VI) при $\text{pH} 1\text{--}6,5$ переважає $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ [4]. Відносна кількість кожного виду оксіаніонних форм Cr(VI) сильно пов'язана з pH розчинів [3] і pH природних вод [5]. Дослідники, які займаються розробкою нових адсорбентів для ефективного видалення Cr(VI) із вод різного походження для приготування робочих розчинів використовують як K_2CrO_4 [5], так і $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ [6]. Адсорбентами Cr(VI) слугує широкий спектр речовин природного та синтетичного походження серед яких значне місце посідає поліанілін (ПАН) [7].

Очевидно, що хромат та дихромат аніони завдяки своїм розмірам, а відповідно і ступенем гідратації у водних розчинах, повинні володіти і різною адсорбційною активністю на однаковому за природою адсорбенті. Однак, це у жодній із праць не обговорюється. Для визначення рівноважної концентрації Cr(VI) дослідники використовують оптичну спектроскопію.

Метою нашої роботи було дослідити та порівняти оптичні спектри аніонів CrO_4^{2-} та $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ як таких, які за певних умов можуть як взаємно перетворюватись, так і перебувати в розчинах при проведенні досліджень, пов'язаних з адсорбцією різними за природою адсорбентами та різних умовах. А також на прикладі дослідження адсорбції CrO_4^{2-} та $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ зразком ПАН показати відмінність у значеннях відсотків видалення та адсорбційної здатності.

Вихідні розчини CrO_4^{2-} та $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ для досліджень готували із калій хромату (K_2CrO_4) та калій дихромату ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) в перерахунку на хром. Електронні спектри розчинів записували за допомогою спектрофотометрів "Ulab S 108UV" та "Cadas 100". Діапазон довжин хвиль $200\text{--}600 \text{ нм}$ та $350\text{--}600 \text{ нм}$, роздільна здатність сканування 10 нм . Об'єм розчинів становив 100 мл , а маса адсорбента – $0,1 \text{ г}$. Розчинником в усіх випадках слугувала дистильована вода.

На рис. 1 зображено електронні спектри водних розчинів хромат (CrO_4^{2-}) та дихромат ($\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$) іонів в межах $200\text{--}600 \text{ нм}$ та $350\text{--}600 \text{ нм}$ за концентрацій $50\text{--}250 \text{ мг/л}$. Як бачимо з рис. 1, а, для спектрів CrO_4^{2-} властиві три інтенсивні смуги поглинання за ~ 200 , ~ 270 та $\sim 370 \text{ нм}$, а для спектрів $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ за ~ 200 , ~ 260 та ~ 350 , а також плече при 450 нм (рис. 1, б). Для аналітичного контролю за вмістом CrO_4^{2-} та $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ можна використовувати електронні спектри в межах $350\text{--}500$ чи $350\text{--}600 \text{ нм}$, відповідно (рис. 1, в і г). Запис спектрів у вказаних діапазонах є необхідним для врахування можливого впливу суспензії адсорбента на оптичну густину розчинів адсорбату.



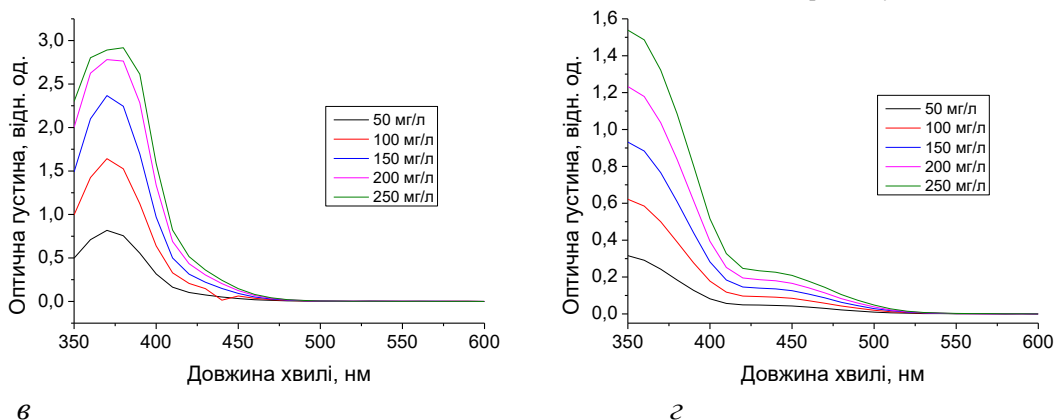


Рис. 1. Електронні спектри водних розчинів: *а, в* – CrO_4^{2-} ; *б, г* – $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$

Залежності оптичної густини від концентрації водних розчинів CrO_4^{2-} і $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ зображено на рис. 2. Як бачимо, інтенсивність поглинання розчинами CrO_4^{2-} (рис. 2, *а*) є, практично, удвічі більшою за інтенсивність поглинання розчинами $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ (рис. 2, *б*). Однак лінійна залежність для розчинів CrO_4^{2-} простежується тільки до концентрації аналіта рівній 150 мг/л тоді, як для розчинів $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ ця залежність є строго лінійною в межах концентрацій 0–250 мг/л. Зменшення інтенсивностей смуг поглинання розчинами CrO_4^{2-} за концентрацій 200 та 250 мг/л (рис. 2, *а*) зумовлені технічними можливостями приладів. Кореляційний коефіцієнт (R^2) є вищим для концентраційної залежності розчинів $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ і становить 0,99994.

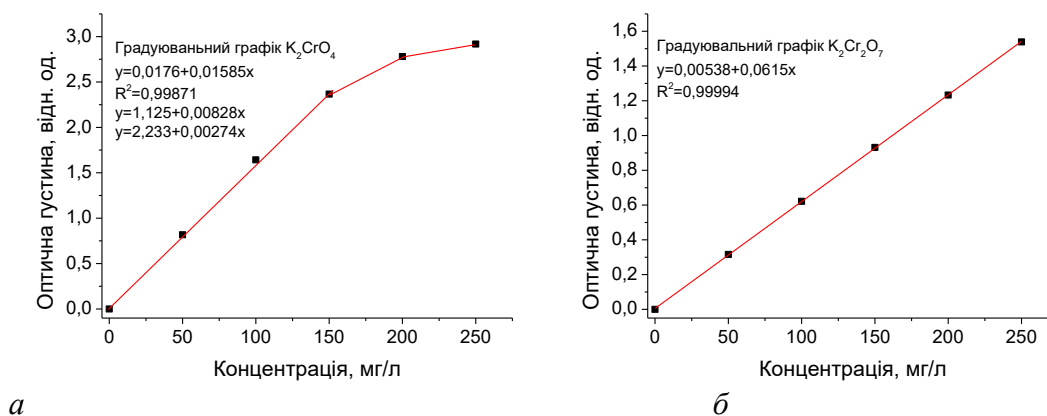


Рис. 2. Градувальні графіки: *а* – CrO_4^{2-} ; *б* – $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$. Залежність оптичної густини водних розчинів від концентрації

На рис. 3, як приклад, зображено зміну інтенсивностей смуг електронних спектрів водних розчинів CrO_4^{2-} і $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ в процесі адсорбції зразком ПАН за рН 5,6–6,0. Із рис. 3 бачимо, що в процесі адсорбції CrO_4^{2-} і $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ зразком ПАН (0,1 г) із розчинів з початковою концентрацією 100 мг/л відбувається зменшення значень інтенсивностей смуг поглинання упродовж часу дослідження – 8 640 хв без зміни характеру та зміщення смуг поглинання. Отже, як бачимо з рис. 3, взаємоперетворень CrO_4^{2-} і $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ в процесі адсорбційного дослідження не простежується [4].

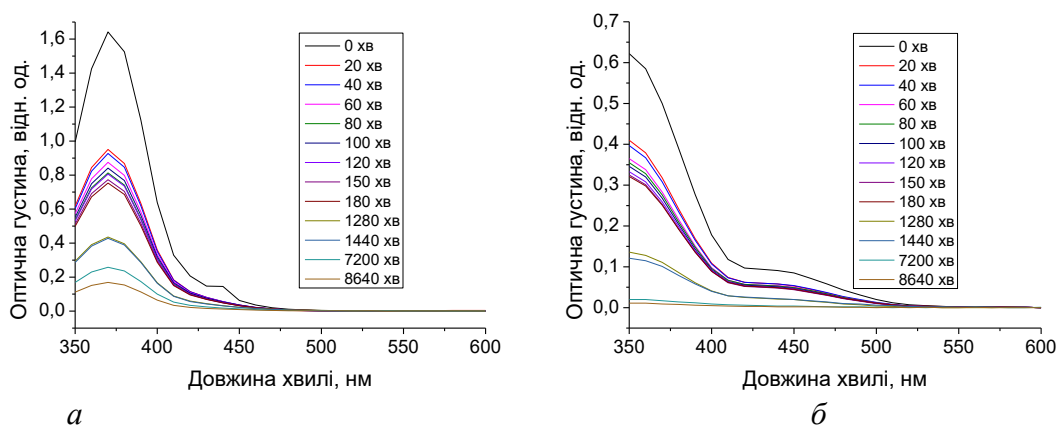


Рис. 3. Електронні спектри розчинів: *а* – CrO_4^{2-} ; *б* – $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ за концентрацій 100 мг/л. Час перебігу адсорбції вказано у вставках на полі рисунків

Визначені за результатами адсорбційних досліджень, відсоток видалення (%) та значення величини адсорбції становлять: для CrO_4^{2-} – 89 % та 89 мг/г, а для $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ – 98 % та 98 мг/г. Важливим є той факт, що зміна концентрації визначуваних аніонів не призводить до зміни характеру смуг поглинання, що підтверджує відповідність процесу адсорбції наявних у розчинах оксіаніонів Cr(VI). Простежується тільки зміна інтенсивності смуг, що відповідає зменшенню концентрації аналітів у досліджуваних розчинах завдяки адсорбції.

З отриманих результатів бачимо, що при проведенні адсорбційних стосовно Cr(VI), як у виді CrO_4^{2-} , так і $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ досліджень можна стверджувати, що спорідненість аніонів $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ до адсорбента ПАН є вищою за спорідненість аніонів CrO_4^{2-} .

Дослідження проводили за часткової підтримки Simons Foundation (ID гранту – 1290588).

1. Xia S., Song Z., Jeyakumar P., Xia P., Shaheen S.M., Rinklebe J., Ok S., Bolan N., Wang H. // Crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 2019. V. 49(12). P. 1027-1078.
2. Gorny J., Billon G., Noiriell C., Dumoulin D., Lesven L., Madé B. // Environ. Rev. 2016. V. 24(14). P. 503-516.
3. Fenti A., Chianese S., Iovino P., Musmarra D., Salvestrini S. // Appl. Sci. 2020. V. 10(18). P. 6477-6498.
4. Li Y., Gao B., Wu T., Sun D., Li X., Wang B., Lu F. // Water. Res. 2009. V. 43(12). P. 3067-3075.
5. Li Z., Hong H. // J. Hazard. Mater. 2009. V. 162(2-3), 1487-1493.
6. Mthombeni N.H., Mbakop S., Rays S.C., Leswifid T., Ochiengd A., Onyango M.S. // J. Environ. Chem. Eng. 2018. V. 6(4). P. 4008-4017.
7. Jiang Y., Liu Z., Zeng G., Liu Y., Shao B., Li Z., Liu Y., Zhang W., He Q. // Environ. Sci. Pollut. Res. 2018. V. 25(7). P. 6158-6174.

УДК 546.77'78+547.857.4

СИНТЕЗ, БУДОВА ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІОКСОМЕТАЛАТНИХ АНІОНІВ Mo ТА W З КОФЕЇНІЄМ

С. М. Сияткін, О.С. Пантелеєва

НТУ «Дніпровська політехніка», 49005, пр. Дмитра Яворницького, м. Дніпро, Україна
Panteleieva.O.S@nmu.one

Сполуки поліоксометалатів (ПОМ) маючи унікальні властивості, а саме: протонну провідність, окисно-відновні властивості, відносному малому заряді при досить значній молекулярній масі, можливості варіювання елементних складових та ін., активно досліджуються і використовуються в багатьох галузях науки та техніки.

Синтезовані сполуки поліоксометалатів Mo та W з 1,3,7- триметилксантинієм було досліджено за низкою фізико-хімічними показників.

Склад та будову сполук поліоксометалатів Mo та W з 1,3,7- триметилксантинієм було досліджено за допомогою наступних методів: УФ-, ІЧ-спектроскопію, амперметричні дослідження (для встановлення співвідношення аніонної та катіонної часток), іонометричне визначення (для визначення заряду катіона), термогравіметричний аналіз та ізоермічні витримки (для встановлення термічної поведінки та складу синтезованих сполук), молярна електропровідність (для визначення співвідношення реагуючих складових сполук) та рентгеноструктурний аналіз на монокристалі (для встановлення кристалічної будови нових синтезованих сполук).

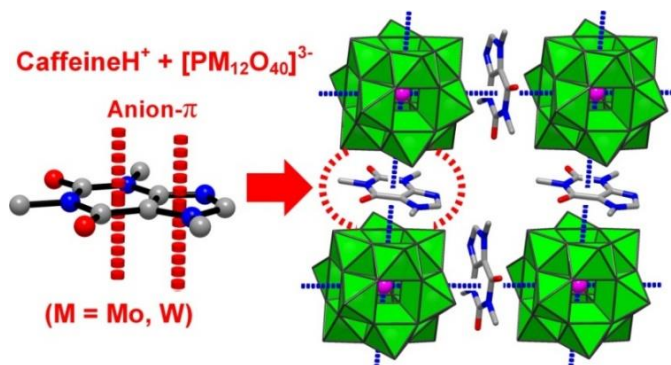


Рисунок 1. Принципова супрамолекулярна структура іонних поліоксометалатів $(\text{HCaf})_3[\text{PM}_{12}\text{O}_{40}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ $[\text{M} = \text{Mo}, \text{W}]$, [1]

За допомогою рентгеноструктурного аналізу було одержано важливі результати для розуміння та проектування кристалічних сполук гібридного типу (рис.1), які було описано у статтях [1 – 3].

1. Panteleieva, O.S. Face-to-face stacking of caffeinium and $[\text{PM}^{\text{VI}}_{12}\text{O}_{40}]^{3-}$ ions: A synthon for crystal engineering with purine bases / O.S. Panteleieva, A.V. Shtemenko, K.V. Domasevitch // Inorganic Chemistry Communications. – 2018. – Vol. 94. – P. 119–122

2. Panteleieva, Olha. S. Supramolecular networks supported by anion $\cdots\pi$ linkage of Keggin-type heteropolyoxotungstates / Olha S. Panteleieva, Vira V. Ponomarova, Alexander V. Shtemenko and Kostiantyn V. Domasevitch // Acta Cryst. Section C: Structural Chemistry – 2020. – Vol. 76.– P. 753–762.

3. Olha S Panteleieva, Alexander V Shtemenko, Ganna A Senchyk, Vira V Ponomarova, Bartomeu Galmés, Antonio Frontera, Eduard B Rusanov, Kostiantyn V Domasevitch / Anion- π stacks of Lindqvist superoctahedra $[\text{Mo}_6\text{O}_{19}]^{2-}$ supported by caffeinium and theophyllinium cations Inorganica // Chimica Acta. – 2022. . – Vol. 537.– P. 120945-120955.

УДК 539.4.013

ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КОРОЗІЙНОЇ СТІЙКОСТІ АЛЮМІНІЄВИХ СПЛАВІВ МЕТОДОМ МІКРОДУГОВОГО ОКСИДУВАННЯ

**О.В. Субботін, В.В. Білозеров, В.В. Субботіна, В.І. Бобров,
І.А. Калініченко, Г.А. Федоренко**

НТУ «ХПІ», м. Харків, вул. Багалія 21, subbotina.valeri@gmail.com

Алюмінієві сплави широко застосовуються в різних галузях промисловості завдяки своїй легкості, високій міцності та стійкості до корозії. Проте в умовах агресивних середовищ або підвищених експлуатаційних навантажень корозійна стійкість може бути недостатньою. Тому для підвищення стійкості алюмінієвих сплавів до корозії застосовуються різні методи захисту, один із яких — мікродугове оксидування (МДО).

Мікродугове оксидування є ефективним методом створення на поверхні алюмінієвих сплавів оксидних шарів, які забезпечують захист від корозії, підвищують зносостійкість та покращують декоративні властивості виробів. Процес МДО дозволяє формувати керамічні покриття з високими фізико-механічними та хімічними характеристиками, що суттєво розширює область застосування алюмінієвих сплавів.

Для визначення захисних властивостей МДО-покриттів на алюмінієвих сплавах (АМгЗ, АЛ9, В92, 2017 Т4) застосовувався метод краплі відповідно до ГОСТ 9.510-93. Відповідно до підходу фазово-структурної інженерії проаналізований вплив фазового складу і товщини покриттів на їх захисні властивості. Виявлена залежність корозії МДО-покриттів від товщини для різних алюмінієвих сплавів. Показано, що при однаковій товщині покриттів швидкість проникнення реактиву змінюється у великому інтервалі.

При цьому можна відзначити зменшення швидкості проникнення реактиву зі збільшенням товщини покриття. Таку тенденцію можна пов'язати з підвищенням питомої щільності МДО-покриття при збільшенні його товщини і заліковуванням наскрізних мікропор, характерних для МДО-покриттів малих (до 40 мкм) товщин.

Проте, при однаковій товщині для покриттів, отриманих на різних основах алюмінієвих сплавів, швидкість проникнення реактивів різна. У цьому випадку причиною такої відмінності може бути відмінність у фазово-структурному стані МДО-покриттів. Основними фазами покриття є: α - Al_2O_3 , γ - Al_2O_3 та муліт ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$). Ці фази мають різну питому щільність. Так, щільність фази α - Al_2O_3 дорівнює $3,99 \text{ г/см}^3$, γ - Al_2O_3 – $3,68 \text{ г/см}^3$, муліту ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$) – $3,1 \text{ г/см}^3$.

Результати вивчення фазового складу показують, що може бути отримано як однофазне так і багатофазне покриття в залежності від умов електролізу (склад електроліту, щільність струму, час оброблення) на алюмінієвих сплавах.

Для дослідження ефекту впливу фазового складу на швидкість проникнення реактиву були проведені детальні дослідження на різних типах покриттів. Характерною особливістю таких покриттів було формування або 2-х фазного стану з α - Al_2O_3 і γ - Al_2O_3 фаз при формуванні в лужному електроліті, або формування базової мулітної фази з поступовим перетворенням в аморфноподібну при великому вмісті силікатної складової.

Показано, що формування однофазного стану і фаз, які містять кремній призводить до диспергування структурного стану аж до рентгеноаморфного, що в значній мірі перешкоджає проникненню реактиву та робить таке покриття захисним.

Дослідження та фінансування здійснені у рамках проєктів: EU #3055 EURIZON “Combined technologies of metallic surface modification by micro-arc oxidation and boriding for critical machine parts with high contact loads” та NRFD ID: 2023.04/0036 “Research and development of device for restoring elements of military equipment by means of discrete-continuous strengthening of structures”.

УДК 669.295.539.121

ЗАКОНОМІРНОСТІ МІКРОДУГОВОГО СИНТЕЗУ ОКСИДІВ НА АЛЮМІНІЄВИХ СПЛАВАХ

О.В. Субботін, В.В. Білозеров, В.В. Субботіна, І.М. Колупаєв, С.А. Князєв, С.О. Фесюков

НТУ «ХПІ», м. Харків, вул. Багалія 21, subbotina.valeri@gmail.com

Метод мікродугового оксидування (МДО) полягає у створенні на поверхні деталі модифікованого шару, що складається переважно з високотемпературних оксидів [1-2].

Наразі залишаються питання, пов'язані із закономірностями формування фазового складу покриттів під час мікродугового оксидування. Розуміння закономірностей формування фазового складу в покриттях на алюмінієвих сплавах різного складу створює передумови для розроблення покриттів заданого фазового складу, що забезпечує стабільні характеристики під час тривалої експлуатації виробів з МДО-покриттями.

У роботі МДО-обробці піддавалися деформовані алюмінієві сплави (АМг6, АМц, Д16). Електроліз проводили в анодно-катодному режимі в лужному електроліті з додаванням рідкого скла (Na_2SiO_3), що забезпечує отримання покриттів з підвищеними фізико-механічними характеристиками (адгезія, мікротвердість, зносостійкість та ін.).

Встановлено, що на початковій стадії формування покриття (товщина до 30 мкм), на всіх сплавах воно однофазне та являє собою оксид у формі $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Зазначимо, що за малої товщини плівки (відбувається велике тепловідведення в метал) та малої потужності мікророзрядів, формується низькотемпературний оксид $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Одночасно протікання двох процесів: електрохімічне окислення і розпушення мікророзрядами плівки, що утворюється, призводить до утворення двошарового покриття (технологічний пухкий шар і основний щільний шар). Нижченаведені результати відносяться до основного шару.

З подальшим зростанням товщини покриття (потужність розрядів збільшується) фазоутворення буде, мабуть, визначатися термічною стабільністю $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Дані рентгеноструктурного аналізу показали, що на основі $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ формуються тверді розчини заміщення катіонного типу за рахунок легування катіонами основи. Ці катіони впливають на міграцію іонів алюмінію і тим самим визначають термічну стабільність $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Наші дослідження показали, що Mg (сплав АМг6) підвищує термічну стабільність $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ і тому покриття на сплаві АМг6 складається з $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Mn (сплав АМц) знижує термічну стабільність – реалізується поліморфне перетворення $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3 \rightarrow \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, основна фаза покриття $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (корунд). Що стосується Cu (сплав Д16), то тут виявляється менший вплив на стабільність $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ порівняно з Mg, покриття двофазне, що складається з $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ та $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Дослідження показали, що для формування МДО-покриттів заданого фазового складу потрібно підбирати марку алюмінієвого сплаву певного хімічного складу.

1. Curran J.A., Clyne T.W. Thermo-physical properties of plasma electrolytic oxide coatings on aluminium. Surface and coatings technology. 2005. Vol. 199. Iss. 2–3. P. 168–176.

2. Lv P.X., Chi G.X., Wei D.B., Di S.C. Design of scanning micro-arc oxidation forming ceramic coatings on aluminium alloy. Advanced materials research. 2011. Vol. 189–193. P. 1296–1300.

Дослідження та фінансування здійснені у рамках проєкту EU #3055 EURIZON “Combined technologies of metallic surface modification by micro-arc oxidation and boriding for critical machine parts with high contact loads”.

УДК 54.06, 691, 53.091

ТЕХНОЛОГІЧНІ ПАРАМЕТРИ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ ПІНОПОЛІУРЕТАНУ

Т.В. Фурс, О.А. Мікуліч, О.І. Гулай, В.Я. Шемет, О.В. Сад

*Луцький національний технічний університет,
43018 вул. Львівська, 75, Луцьк, Україна, e-mail: t.furs@lntu.edu.ua*

Пінополіуретани (ППУ) – це представники класу пористих матеріалів, які одержують у результаті хімічної реакції між поліолом та поліізоціанатом з додаванням спінювача. Їх отримують способом заливки або напиленням на поверхню в рідкому вигляді під тиском.

ППУ є одними з найбільш широко використовуваних і ефективних матеріалів у системах тепло-, холодо-, шумоізоляції й герметизації у будівництві, промисловості (автомобільній, меблевій, легкій, взуттєвій та ін.), у господарських роботах, в якості наповнювачів і прокладок у виробках різного призначення.

Широкий спектр властивостей поліуретанової піни для багатьох конкретних застосувань досягається внаслідок модифікації складу: ізоціанатів, поліолів, каталізаторів, поверхнево-активних речовин, спінювачів та добавок [1-2].

Етапи формування пінополіуретану включають чотири фази: зародження комірок, їх ріст, поділ мікрофаз і полімеризацію [3]. Вагомими факторами, що впливають на швидкість спінювання та якість отриманих пін з ППУ, є температура навколишнього середовища, співвідношення сировини, температура прес-форми, температура матеріалу та час затвердіння [4-5].

Оскільки процес спінювання відбувається самовільно і його важко контролювати, то будь-які досягнення, пов'язані з технологічними аспектами одержання таких матеріалів, є корисними або ж альтернативними.

У даній роботі проведено дослідження технологічного процесу одержання спіненого поліуретану на основі двокомпонентної системи, яка являла собою суміш поліолу (Elastopor H 1701/9) та поліізоціанату (ISO PMDI 92140) у заданому співвідношенні. Поліол у своєму складі містив спінювач.

При змішуванні попередньо зважених у відсотковому співвідношенні вихідних компонентів отримували однорідну по всьому об'єму суміш. Отриману реакційну суміш виливали у підготовлені ємності (поліетиленову тару), де відбувалося спінювання, формування та отвердіння композицій пінополіуретану. Процес виконували при кімнатній температурі (20 ... 22 °С). Технологічну схему отримання пінополіуретану представлено на рисунку 1.

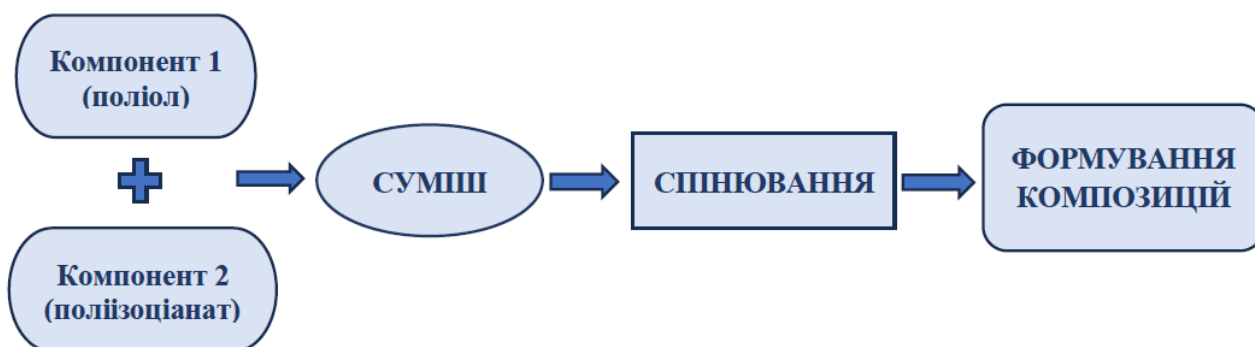


Рис. 1. Принципова технологічна схема отримання ППУ

У результаті спостережень встановлено наступні характеристики процесу спінювання поліуретану:

- висока швидкість реакції спінювання, що завершується за 2 ... 4 хв;
- під час реакції виділяється велика кількість тепла, що, зумовлює значне підвищення температури двокомпонентної системи (до 50-60 °C);
- швидке збільшення об'єму реакційної суміші у 10-50 разів.

Технологічні параметри процесу спінювання й отвердіння поліуретану наведені у таблиці 1.

Табл. 1. Технологічні параметри процесу отримання поліуретану

Властивості	Одиниці	Значення
Температура компонентів	°C	20
Тривалість змішування	с	10
Час старту реакції	с	50
Час сумішоутворення	с	130
Час підйому (спінювання)	с	200
Час повного отвердіння	год	8
Густина піни вільного спінювання для А : В = 100 : 115	кг/м ³	50

У роботі досліджено особливості технології одержання пінополіуретанів (ППУ) способом заливки у форми. Описано методику одержання ППУ-композицій на основі двокомпонентної системи (поліол та полізоціанат) різного вагового співвідношення компонентів. Представлено характеристику вихідних компонентів та наведено принципову технологічну схему отримання ППУ. Встановлено технологічні параметри процесу спінювання поліуретану.

Можливість управління технологією одержання дозволяє отримувати матеріал ППУ різної пористості та густини і в такий спосіб модифікувати його фізико-механічні властивості.

Дослідження технологічних аспектів одержання ППУ є корисним в плані розширення спектру модифікування цього матеріалу, видозміні й оптимізації властивостей і характеристик щодо конкретного застосування.

1. Ates, M., Karadag, S., Eker, A.A. and Eker, B. (2022), Polyurethane foam materials and their industrial applications. Polym Int, 71: 1157-1163. <https://doi.org/10.1002/pi.6441>
2. N.V. Gama, A. Ferreira, A. Barros-Timmons Polyurethane Foams: Past, Present, and Future. Materials, 11 (10) (2018), p. 1841. <https://doi.org/10.3390/ma11101841>.
3. Zhang, C.; Tong, X.; Deng, C.; Wen, H.; Huang, D.; Guo, Q.; Liu, X. The foaming dynamic characteristics of polyurethane foam. J. Cell. Plast. 2020, 56, 279–295.
4. Quanxiao, D. O. N. G., Shuming, L. I., Xinguo, Z. H. E. N. G., Yongjiang, X. I. E., Liangwei, L. O. U., Zhi, Z. E. N. G., & Jing, L. I. U. (2018). Effect of Temperature on Mechanical Properties of Polyurethane Solidifying System. China Plastics/Zhongguo Suliao, 32(9).
5. Wang J, Zhang C, Deng Y, Zhang P. A Review of Research on the Effect of Temperature on the Properties of Polyurethane Foams. Polymers. 2022; 14(21):4586. <https://doi.org/10.3390/polym14214586>

UDC 538.9

PHASE SEPARATION AND ELEMENTAL REDISTRIBUTION IN GERMANIUM-RICH HAFNIA FILMS STUDIED USING SCANNING AUGER ELECTRON MICROSCOPY

L. Khomenkova^{1,2}, S. Ponomaryov¹, D. Khomenkov³, O. Melnichuk³, F. Gournilleau⁴

¹*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, 41 Nauky ave.,
Kyiv 03028, Ukraine, khomen@ukr.net*

²*National university "Kyiv-Mohyla academy", 2 Skovorody str., 04070 Kyiv, Ukraine*

³*Mykola Gogol State University of Nizhyn, 2 Hrafska str., Nizhyn 16600, Ukraine*

⁴*CIMAP, Normandie Univ, ENSICAEN, UNICAEN, CEA, CNRS, Caen, France*

Developing multicomponent materials and exploring their various applications requires continuous monitoring of their optical and electrical characteristics, supported by structural characterization and chemical composition analysis. Techniques such as Raman scattering, FTIR spectroscopy, and X-ray diffraction provide valuable information about a material's morphology and crystalline structure. Transmission electron microscopy allows for a deeper examination of the material's structure, providing insights at the nanoscale and atomic levels. However, it often involves complex specimen preparation procedures. Additionally, when dealing with multicomponent nanoscale materials, analyzing elemental distribution becomes challenging due to the overlapping of grains with varying sizes and variable chemical compositions.

Among the different available methods, a combination of Auger electron spectroscopy (AES) and high-resolution scanning electron microscopy (SEM) has proven to be an effective tool. This approach was successfully used to analyze the spatial distribution of Si and Ge inside GeSi nanoislands grown on a Si substrate [1]. AES can provide chemical composition analysis with lateral resolution of ~3–5 nm and depth resolution of ~1 nm. The AES spectra were recorded with effective control of thermal drift at the analyzed site through regular electronic corrections of its spatial position on the SEM image taken from the corresponding surface area.

The utility of this method for monitoring elemental redistribution in polycrystalline ceramics during thermal treatment has also been demonstrated [2]. For example, during the sintering of (Zn,Mg)O ceramics, significant Zn and Mg accumulation at the grain boundaries was revealed. In the present report, we apply scanning Auger electron microscopy to study the spatial element distribution in Ge-rich HfO₂ films, with different Ge content and a thickness of approximately 150 nm, grown on a Si substrate by RF magnetron sputtering. The films were annealed in an inert atmosphere at 400–900 °C for 15 minutes to study the effect of annealing temperature on Ge distribution.

The results show a spatially homogeneous chemical composition in both as-deposited films and those annealed at 400 °C. Phase separation begins at 500 °C, with the formation of Ge-rich and HfO₂ phases. Pronounced Ge nanocluster formation occurs at 600–700 °C, which corroborates previously obtained Raman scattering data. At higher temperatures, a decrease in Ge content was observed, particularly in films with lower initial Ge concentrations, where the effect was significant at the top surface. This decrease is explained by the formation of volatile GeO and its outward diffusion from the films. Notably, no Si diffusion from the underlying substrate into the film was observed, indicating the thermal stability of the hafnia-based films in direct contact with the Si substrate.

1. S.S. Ponomaryov, V.O. Yukhymchuk, P.M. Lytvyn, M.Ya. Valakh. Direct Determination of 3D Distribution of Elemental Composition in Single Semiconductor Nanoislands by Scanning Auger Microscopy. *Nanoscale Res. Lett.* 11, 103 (2016).

2. N. Korsunskaya, Yu. Polishchuk, S. Ponomaryov, K. Kozoriz, S. Chusnutdinov, O. Melnichuk, L. Melnichuk, L. Khomenkova, Effect of MgO/ZnO ratio on the formation process of Mg_xZn_{1-x}O ceramics, *Heliyon*, 10, e35594 (2024).

УДК 539.2:669.24

СТРУКТУРА ТА ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ НІКЕЛЕВИХ ПОКРИТТІВ, ОТРИМАНИХ ПРОГРАМОВАНИМ ІМПУЛЬСНИМ СТРУМОМ

В.В. Титаренко

НТУ «Дніпровська політехніка», пр. Д. Яворницького, 19, 49005 Дніпро, Україна
tytarenko.valentina@gmail.com

Електролітичні покриття на основі нікелю широко використовуються для захисту металевої поверхні від корозії, механічного пошкодження, підвищення міцності та зносостійкості виробів. В останні роки все більшого поширення набувають композиційні покриття, осажені з гальванічної ванни, що включає різні неметалеві частинки: карбід, борида, оксиди, сульфід і т.д. Дисперсні неметалеві частинки дозволяють значно підвищити експлуатаційні характеристики покриттів, наприклад твердість, зносостійкість, корозійну стійкість. Особливий інтерес як модифікатори композиційних гальванічних покриттів представляють ультрадисперсні частинки алмазу (УДА), які дозволяють одночасно забезпечити комплекс високих службових характеристик деталей з композиційним покриттям [1-3].

Комплексним вирішенням проблеми покращення функціональних властивостей поверхні в даній роботі є модифікація металевої матриці частинками УДА з отриманням композиційних електролітичних покриттів (КЕП) на основі нікелю і застосування нестаціонарних режимів електролізу. В імпульсному електролізі управління властивостями електролітичних покриттів здійснюється за допомогою таких параметрів імпульсного струму, як середня густина струму ($j_{\text{ср}}$), частота проходження імпульсів (f), шпаруватість імпульсів (Q - відношення періоду імпульсу до його тривалості). Необхідно відзначити, що варіювання частотою і шпаруватістю імпульсів струму дозволяє повною мірою розкрити всі переваги використання нестаціонарного електролізу в порівнянні зі стаціонарним.

Для осадження композиційних нікелевих покриттів із сульфатного електроліту нікелювання, що містить частинки УДА концентрацією 2 г/л, використовували програмований імпульсний струм з рівною тривалістю пачок імпульсів уніполярного струму рівною 36 хв, частотою 50 Гц, середньою густиною струму 100 А/м² і послідовною від пачки до пачки зміною шпаруватості імпульсів (Q): пачка I – 2, пачка II – 12, пачка III – 25, пачка IV – 38, пачка V – 50; тривалість імпульсів змінювалась від 10 мс до 0,4 мс при постійному періоді 20 мс. Для порівняння були отримані композиційні нікелеві покриття з водного розчину електроліту за допомогою постійного струму густиною 100 А/м².

За час протікання пачок I - II імпульсів тривалістю 10-1,7 мс і амплітудою густиною струму 200-1200 А/м² осаджаються шари композиційного нікелевого покриття товщиною 3-4 мкм з найменшим вмістом частинок УДА в металевій матриці (0,1 ат.%), про що свідчать досліджень їх структури та елементного складу.

З фотографій мікроструктур торцевих шліфів видно, що в сірчаноокислому електроліті нікелювання, що не містить частинки УДА, при постійному струмі густиною 100 А/м² формується в поперечному перерізі стовпчаста структура нікелю (рис. 1 а). Це пов'язано з початковими стадіями електрокристалізації, при яких зародки, що утворилися в момент включення струму, починають зростати за допомогою взаємного «виклинювання», яке визначає велику швидкість росту в напрямку перпендикулярному до підкладки і малу - в паралельному. З порівняння торцевих шліфів композиційних нікелевих покриттів, осаджених за допомогою програмованого імпульсного струму, видно, що характер росту в поперечному перерізі перших шарів покриття подібний - також спостерігається стовпчаста структура росту (рис. 1 г). Переривчастий характер імпульсного струму та збільшення шпаруватості імпульсів струму сприяє тому, що за час протікання пачок III-V імпульсів тривалістю 0,8-0,4 мс та

амплітудною густиною струму $2500\text{--}5000\text{ А/м}^2$ осаджуються мікросhari композиційного нікелевого покриття товщиною 2 мкм, із найбільшим вмістом частинок УДА (табл. 1). Більш інтенсивне введення частинок дисперсної фази у покриття, що формується, обумовлене високими миттєвими густинами струму в імпульсах ($j_{\max}=5000\text{ А/м}^2$), а, отже, і розрядом іонів нікелю при більш високих значеннях катодної перенапруги ($\approx 1,00\text{ В}$).

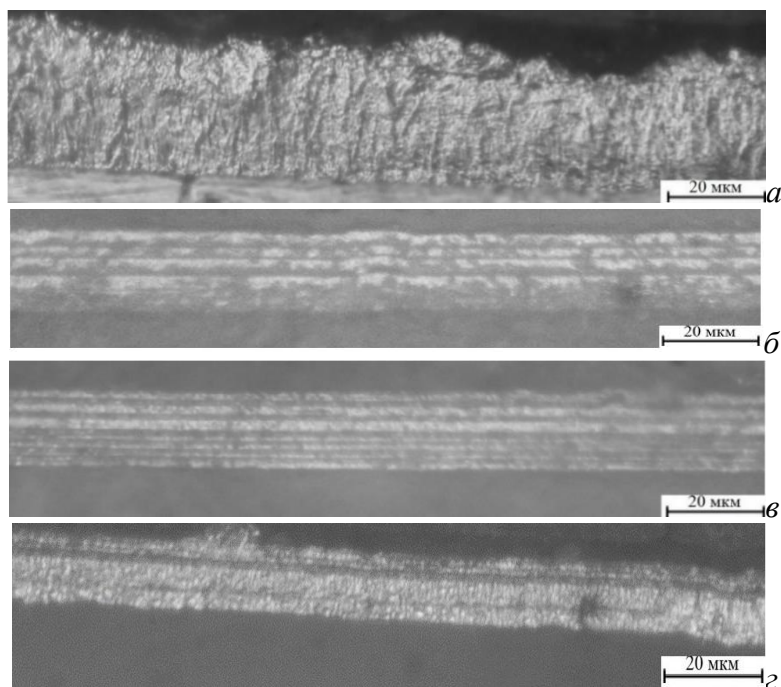


Рис. 2 Структура нікелевого покриття у поперечному перерізі: а) Ni (постійний струм ($j=100\text{ А/м}^2$)); б) Ni+УДА (імпульсний струм ($j_{\text{сер}}=100\text{ А/м}^2$, $f=50\text{ Гц}$, $Q=2$)); в) Ni+УДА (імпульсний струм ($j_{\text{сер}}=100\text{ А/м}^2$, $f=50\text{ Гц}$, $Q=50$)); г) Ni+УДА (програмований імпульсний струм ($j_{\text{сер}}=100\text{ А/м}^2$, $f=50\text{ Гц}$, $Q=2\div 50$))

Збільшення концентрації частинок дисперсної фази у верхніх шарах КЕП до 0,19 ат.% і більш рівномірний їх розподіл у покриттях, осаджених за допомогою програмованого імпульсного струму, призводить до формування дрібнозернистих більш щільно упакованих покриттів, визначаючи збільшення мікротвердості та зносостійкості нікелевих покриттів.

З результатів вимірювання мікротвердості та випробувань зразків на знос слідує, що покриття нікелю, електроосаджені за допомогою постійного струму, за 5 годин зносу втрачають 10% своєї маси. При переході від режиму осадження за допомогою постійного струму до імпульсного режиму осадження частотою 50 Гц і шпаруватістю імпульсів 2 мікротвердість покриттів збільшується 1800 МПа до 2530 МПа а знос становить 7%. При збільшенні шпаруватості імпульсів струму від 2 до 50 мікротвердість збільшується до 3180 МПа, а знос зменшується від 7% до 3%. Мікротвердість покриттів, осаджених за допомогою програмованого імпульсного струму, збільшується до 3490 МПа, а знос зменшується від 3% до 2,5%.

1. Burkat G.K., Fujimura T., Dolmatov V.Yu., Orlova E.A., Veretennikova M.V. Preparation of composite electrochemical nickel-diamond and iron-diamond coatings in the presence of detonation synthesis nanodiamonds. *Diamond & Related Materials*. 2005. Vol. 14, No.11-12. P. 1761–1764.

2. Tytarenko V.V., Zabudovsky V.A., Shtapenko E.Ph. Structure and properties of composite nickel coatings deposited by means of programmable pulsed current under laser irradiation. *Inorganic materials: applied research*. 2019. Vol. 10. No. 3. P. 589–594.

3. Е. П. Штапенко, В. В. Титаренко, В. О. Забудовський, Є.О. Воронков, Квантово-механічні дослідження процесів електрокристалізації металів та композиційних матеріалів (Дніпро: Середняк Т.К.: 2024), с. 199.

ТЕОРЕТИЧНЕ ПОРІВНЯННЯ АНОДНОГО ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ТА ВИЛУЧЕННЯ ДИБЕНЗОКСАЗЕПІНУ НА НАНОЧАСТИНКАХ КУПРУМ (II) СУЛЬФІДУ

В.В. Ткач^{1,9}, М.В. Кушнір¹, Т.В. Морозова², М.Ж. Монтейру³, І. О'Ніл де
Маскареньяш Гайвау⁴, Я.Г. Іванушко⁴, А.О. да Сілва⁵, П.І. Ягодинець¹, Ж.О. Кормош⁶,
О.В. Луганська⁷, Ж.Р.Гарсія⁸, Г.М. Поченчук¹, Ж.І. Феррау да Пайва Мартінш⁹

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Національний транспортний університет, Україна

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім.. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

⁸Штатний університет м. Понта-Гросса, Бразилія

⁹Факультет інженерії університету Порту, Португалія

Під терміном «циркулярна економіка» або «економіка замкнутого циклу» розуміється економічна модель, що полягає у відновлювальному виробництві. На відміну від традиційної – «лінійної економіки» для циркулярної відходи виробництва сприймаються як вторинна сировина для того самого або іншого процесу, що оптимізує виробничі ланцюги, технологічні схеми, нормує антропогенне навантаження на довкілля, тим самим здешевлюючи виробництво. Вважається, що циркулярна економіка є частиною Четвертої промислової революції і її проявами є розробка альтернативної енергетики, біотехнологій і так звана «зелена хімія», яка полягає у заміні хіміко-технологічних процесів на економічно вигідніші та екологічно дружніші. Іншими словами, перехід до циркулярної економіки є важливою частиною зеленого переходу.

У зеленій хімії реалізація принципів циркулярної економіки полягає у:

- Заміна синтетичних матеріалів на матеріали з відновлюваної сировини;
- Рекуперація відходів традиційних та «зелених» хімічних процесів з метою зменшення впливу на довкілля;
- Використання матеріалів з відновлюваної сировини для альтернативних джерел енергії (головно, сонячної енергетики).

Україні доводиться переходити до екологічно безпечної економіки у воєнний час, цей же перехід складатиме і значну частину післявоєнного відновлення, що включатиме також і утилізацію та рекуперацію відходів та слідових кількостей бойових отруйних речовин, серед яких цікаве місце займає дибензоксазепін, оскільки рекуперація може призводити до синтезу енергоефективного матеріалу.

Дибензоксазепін (Рис. 1 – кодова назва CR) – тобто, згідно номенклатури Ганча-Відмана, гетероциклічна сполука із семичленним циклом і гетероатомами Нітрогену та Оксигену, сконденсована з двома бензеновими кільцями – бойова отруйна речовина, отримана у 1962 році швейцарськими хіміками Хігінботом та Сушицьким. Вона відноситься до подразників комплексної дії.

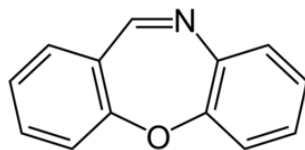


Рис. 1. Дибензоксазепін

За механізмом дії дибензоксазепін схожий на газ бузок, однак вдвічі сильніший. Від контакту зі шкірою всього 2 мг дибензоксазепіну протягом 10 хвилин призведе до почервоніння. 5 мг викликають еритему, а 20 мг – нестерпний біль, що посилюється при

контакті з водою. Тому розробка ефективних та швидких методів визначення дибензоксазепіну – дійсно актуальне завдання, і електрохімічні методи мають перевагу через дешевизну та здатність швидко визначити слідові кількості БОР.

Дибензоксазепін може бути визначеним на аноді, модифікованому наночастинками Купрум (II) сульфід, нанесеними на провідний полімер. В першому випадку реакція може відбуватися за двома сценаріями:

- Окиснення за атомом Нітрогену
- Електрополімеризація.

У другому ж єдиним сценарієм є відривлення зв'язку Шиффа.

Електрополімеризація дибензоксазепіну може бути використаною для утилізації його відходів, а відповідний полімер – мати широкий спектр застосування, що є особливо цінним в аспекті циркулярної економіки.

Даний електроаналітичний процес описується системою трьох диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{db}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{B}{\delta} (b_0 - b) - r_{11} - r_p \right) \\ \frac{dn}{dt} = \frac{2}{\delta} (r_{11} - r_p) \\ \frac{dc}{dt} = \frac{1}{c} (r_{11} + r_p - r_0) \end{cases} \quad (1)$$

Аналіз моделі показує, що за присутності полімеризаційного сценарію даний електроаналітичний процес може бути ефективно використаним для електрохімічного визначення та вилучення БОР дибензоксазепіну.

PACS: 81.16.-c; 61;78.66.-w

THE INFLUENCE OF THE IMPLANTED IMPURITIES ON THE STRUCTURAL, OPTICAL, AND ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF HgCdTe EPITAXIAL LAYERS

Z. Tsybrii, F. Sizov, M. Vuichyk, K. Svezhentsova, O. Gudymenko, O. Kosulya,
N. Dmytruk, M. Smolii, A. Shekera

*V. Lashkaryov Institute of Semiconductors Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41
Nauky av., 03028 Kyiv, Ukraine*

Modern trends in the development of infrared (IR) photodetecting devices are aimed at creating multispectral multi-element IR radiation receivers for more reliable obtaining of information about the detailed distribution of thermal fields in the spectral range of 1 – 14 μm and high-frequency (terahertz, THz) information signals. Due to its electrical and optical properties, the HgCdTe (MCT) material was and remains for near future one of the promising materials for SWIR (Short Wavelength IR), MWIR (Medium Wavelength) and LWIR (Long Wavelength) quantum IR detectors [1]. The band-gap of Hg_{1-x}Cd_xTe can be varied by altering the composition from x = 1 (CdTe band gap E_g ≈ 1.6 eV) to x = 0.165 (band gap E_g ≈ 0). Such and other features of the MCT material make it possible to manipulate its zone structure and apply it to the implementation of broadband integral radiation detectors for the IR and THz spectral ranges. Development of the manufacturing technology of IR radiation receivers was carried out and will continue to be carried out by expanding the range of their sensitivity and improving sensitivity parameters in a number of technological directions. Currently, the method of ion implantation is one of the main technological processes for the formation of n–p–

junctions in the creation of multi-element photodetectors of MWIR and LWIR ranges in MCT narrow-gap semiconductor compounds. Radiation defects generated in the process of ion bombardment of the HgCdTe surface play a decisive influence both on the electrophysical properties of ion-implanted layers and on the parameters of photoreceiving structures made on the basis of MCT.

In this work, we studied the influence of the ion implantation of B^+ , Be^+ , Al^+ and I^+ on the optical, structural and electrical characteristics of $Hg_{1-x}Cd_xTe/CdZnTe$ ($x \sim 0.3$) epitaxial layers grown by LPE method. The transformation of the IR spectra was observed in the implanted MCT samples in the temperature range of 77 – 300K: a decrease in the transmission coefficient was found when the HgCdTe surface was doped with heavy aluminum ions. At the same time, when light elements (boron) are implanted, an increase in the IR transmission coefficient was observed.

Structural changes in MCT epitaxial layers after implantation with boron, beryllium and aluminum ions were studied by high-resolution diffractometry methods. On the 2Theta-Omega scan of the samples after Al^+ and B^+ implantation, an increase in the diffuse background is observed from the side of larger angles relative to the (111) MCT reflex. This indicates an increase in local areas with compression deformations. Interstitial defects cause this type of deformation. 2Theta-omega scan of the implanted Be^+ sample has additional diffuse scattering from the side of smaller reflex angles to the (111) MCT reflex, which indicates the presence of non-relaxed tensile strains caused by vacancy-type defects. The electrical characteristics of photodiodes made by the method of implantation of the above-mentioned ions in LPE MCT, are also discussed.

This work was partly supported by the NAS of Ukraine, project No. 0123U100458.

1. F. Sizov, Detectors and Sources for THz and IR, Materials Research Foundations, LLC Forum, Millesville, USA (2020). <https://doi.org/10.21741/9781644900758>

УДК 544.236.2

ОСОБЛИВОСТІ СКЛОУТВОРЕННЯ У СИСТЕМАХ $Tl_2X-C^{III}_2X_3-GeX_2$ ($C^{III} - Ga, In; X - S, Se$)

О.В. Цісар, Л.П. Марушко, Л.В. Піскач

*Волинський національний університет імені Лесі Українки,
пр. Воли 13, 43025 м. Луцьк, Україна, oхана.tsisar@gmail.com*

Халькогенідні напівпровідникові стекла широко застосовуються в оптиці та електроніці завдяки їхнім високим коефіцієнтам заломлення, прозорості, а також термічній і хімічній стійкості. Один із способів розширити їх можливості застосування та впровадити в нові сфери – це модифікація матеріалів. Введення талію в халькогенідні стекла призводить до значних змін у їх структурних і фізичних властивостях, що може мати перспективи для використання в акустооптичних пристроях.

Синтез сплавів для визначення областей склоутворення в системах $Tl_2X-C^{III}_2X_3-GeX_2$ ($C^{III} - Ga, In; X - S, Se$) здійснювався наступним чином. Усі зразки поміщали в кварцові ампули, відкачували до тиску $1,33 \cdot 10^{-2}$ Па та запаювали. Зразки, що містять сульфур, попередньо синтезували методом локального нагріву ампул у полум'ї киснево-газового пальника для зв'язування елементарної сірки при візуальному спостереженні за ходом реакції. Щоб уникнути розбризкування розплаву під час гартування і зменшити втрати через конденсацію пари на стінках ампул, верхню частину ампул термостатували за допомогою азбестового шнура. Після цього здійснювали нагрів зі швидкістю 20-30 К/год до 1300 К. Витримування при максимальній температурі становило 6 год, після чого ампули із розплавом загартовувалися в холодній воді. Скловидний стан сплавів контролювався рентгенофазовим аналізом.

Область існування стекел в системі $\text{Tl}_2\text{S}-\text{Ga}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$ показана на рис. 1. Усі одержані стекла є прозорими в видимій області. Колір стекел змінюється від жовтого біля GeS_2 до насиченого оранжевого. При гарті від 1300 К у склоподібному стані на обмежуючих сторонах отримуються сплави із максимальним вмістом Tl_2S – 66,7 мол. % та Ga_2S_3 – 28 мол. % згідно даних [1]. У склоподібному стані утворюються сполуки Tl_2GeS_3 і $\text{Tl}_2\text{Ge}_2\text{S}_5$ [2]. Стекла системи $\text{Tl}_2\text{S}-\text{Ga}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$ можна застосовувати як матеріали для ефективною фотоіндукованою генерації третьої гармоніки [3].

Область склоутворення у системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{Ga}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$ подана на рис. 2. [4]. У склоподібному стані на стороні $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{GeSe}_2$ отримуються сплави із максимальним вмістом Tl_2Se 45 мол. %. Область склоутворення на обмежуючій стороні $\text{Ga}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$ розташована в інтервалі 72-100 мол. % GeSe_2 [5]. Існує вузька неперервна смуга склоутворення від 13 до 33 мол. % Ga_2Se_3 , яка перетинає весь концентраційний трикутник.

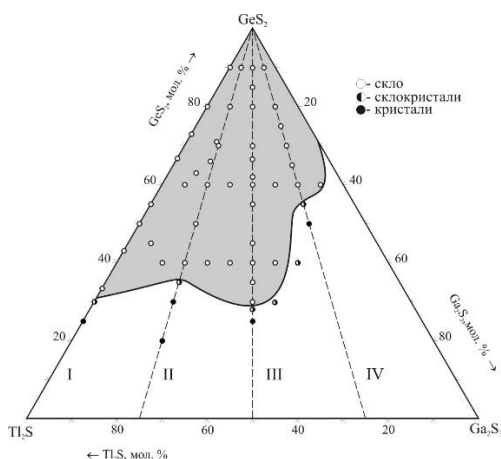


Рис. 1. Область склоутворення в квазіпотрійній системі $\text{Tl}_2\text{S}-\text{Ga}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$

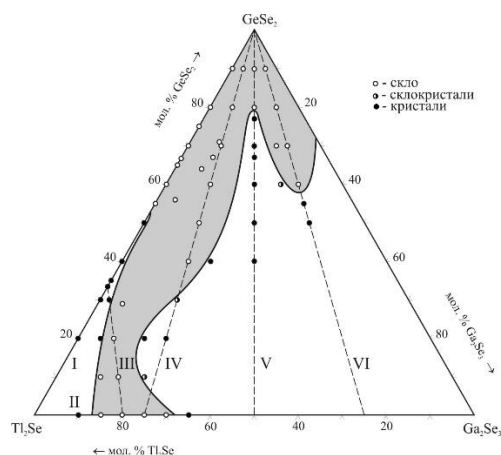


Рис. 2. Область склоутворення в квазіпотрійній системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{Ga}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$

Область існування стекел в системі $\text{Tl}_2\text{S}-\text{In}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$ показана на рис. 3. Усі одержані стекла є прозорими в видимій області. При гарті від 1300 К у склоподібному стані на обмежуючих сторонах отримуються сплави із максимальним вмістом Tl_2S – 66,7 мол. % та In_2S_3 – 30 мол. % [6].

При вибраному режимі гарту в системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{In}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$ (рис. 4). у склоподібному стані на обмежуючих сторонах отримуються сплави із максимальним вмістом Tl_2Se – 45 мол. % та In_2Se_3 – 35 мол. % [6].

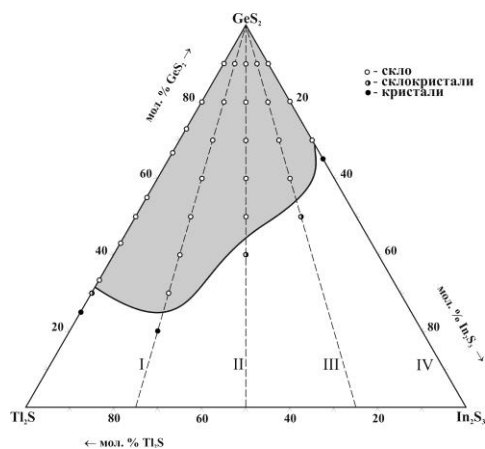


Рис. 3. Область склоутворення в квазіпотрійній системі $\text{Tl}_2\text{S}-\text{In}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$

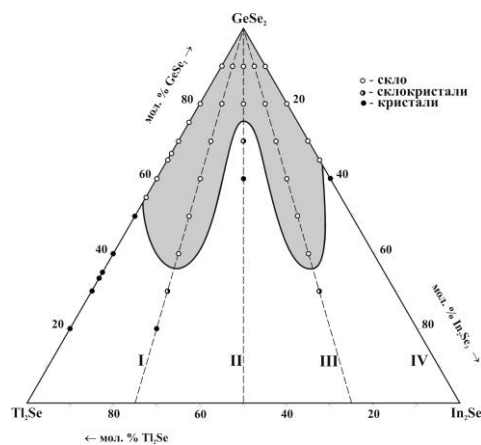


Рис. 4. Область склоутворення в квазіпотрійній системі $\text{Tl}_2\text{Se}-\text{In}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$

Отже у чотирьох германієвмісних квазіпотрійних системах $\text{Ti}_2\text{X}-\text{Ga}(\text{In})_2\text{X}_3-\text{GeX}_2$ ($\text{X} - \text{S}, \text{Se}$) області склоутворення простягаються від GeX_2 , який відіграє роль склоутворювача, і займають досить широкі області концентраційних трикутників.

На основі даних диференційно-термічного аналізу визначено характеристичні температури теплових ефектів (склування, кристалізації та плавлення). Розраховані приведені температури склування для багатьох зразків систем $\text{Ti}_2(\text{S})\text{Se}-\text{Ga}_2\text{S}(\text{Se})_3-\text{GeS}(\text{Se})_2$ мають низькі значення (менше 0,6 і навіть менше 0,5), що вказує на схильність розплавів до кристалізації, а тому можуть бути отримані у склоподібному стані лише при гартуванні із застосуванням жорстких умов. Для системи $\text{Ti}_2\text{S}-\text{In}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$ параметр T_{gr} знаходиться в межах 0,60–0,69, що свідчить про їх високу здатність до склоутворення і можливість одержання при помірних швидкостях охолодження розплавів.

1. Kevshyn A.H., Halyan V.V., Davydyuk H.Y., Parasyuk O.V., Mazurets I.I. Concentration Dependence of the Optical Properties of Glassy Alloys in the $\text{HgS}-\text{Ga}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$ System. *Glass Phys. Chem.*, 2010, 36, 27-32. <https://doi.org/10.1134/S1087659610010050>
2. Borisova Z.U. *Khimiya stekloobraznykh poluprovodnikov*. L.: LGU, 1972. 246 s.
3. $\text{Ti}_2\text{S}-\text{Ga}_2\text{S}_3-\text{GeS}_2$ glasses for optically operated laser third harmonic generation / O. V. Tsisar, L. V. Piskach, O. V. Parasyuk L. P. Marushko, I. D. Olekseyuk, O. V. Zamuruyeva, P. Czaja, P. Karasiński, A. M. El-Naggar, A. A. Albassam, G. Lakshminarayana // *J Mater Sci: Mater Electron*. 2017. 28(2), 19003-19009. <https://doi.org/10.1007/s10854-017-7854-x>
4. Цісар О.В., Піскач Л.В., Марушко Л.П., Олексеюк І.Д., Замуруєва О.В. Склоутворення в системі $\text{Ti}_2\text{Se}-\text{Ga}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$. *Наук. вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*, 2017, 1(37), 63-67.
5. Олексеюк І.Д., Парасюк О.В., Божко В.В., Галян В.В., Петрусь І.І. Склоутворення в системах $\text{Zn}(\text{Cd}, \text{Hg})\text{Se}-\text{Ga}_2\text{Se}_3-\text{GeSe}_2$. Всеукраїнська конференція “Актуальні проблеми фізико-хімії гетерогенних полімерних і дисперсних систем. Наукові записки Рівненського педінституту, м. Рівне, 1997, вип. 3, 158-162.
6. Цісар О.В., Піскач Л.В., Парасюк О.В. Склоутворення в системах $\text{Ti}_2\text{S}(\text{Se})-\text{In}_2\text{S}(\text{Se})_3-\text{GeS}(\text{Se})_2$. Матеріали IX Міжнародної наукової конференції “Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали” (м. Луцьк 1-5 червня 2018 р.). Луцьк, 2018. – С. 106–107.

УДК 667.64:678.026

РОЗРОБКА МОДИФІКОВАНИХ ЕПОКСИКОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ З ПІДВИЩЕНОЮ СТІЙКІСТЮ ДО ДИНАМІЧНИХ НАВАНТАЖЕНЬ

А.В. Чернов, В.П. Кашицький, О.Л. Садова

*Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75,
v.kashytskyi@lntu.edu.ua*

Епоксикомпозитні матеріали широко використовують для формування конструкційних матеріалів [1] та захисних покриттів [2], оскільки мають високу технологічність та адгезійну міцність до субстрату, однак використання таких виробів обмежене в умовах впливу динамічних навантажень через схильність їх до крихкого руйнування. Використання модифікуючих добавок та наповнювачів волокнистого типу забезпечує підвищення ударної в'язкості епоксикомпозитних матеріалів, що потребує визначення оптимального вмісту добавки та розробки технології формування епоксикомпозитів. Використання скловолокна як армуючого агента в полімеркомпозитній промисловості має велику тенденцію, оскільки ціна скловолокна є низькою в порівнянні з вуглецевим волокном або кевларом [3]. Вироби зі

скловолокна мають переваги в тому, що їх можна використовувати в традиційних процесах виробництва композитів (ручне укладання) або в високотехнологічних методах.

Завдяки високій технологічності епоксидних олігомерів до їх складу вводять модифікуючі добавки, зокрема кремнійорганічний лак марки КО-915Б, який за температури формування 120 °С протягом 1 год забезпечує додаткове структурування епоксиполімерної матриці. За такої температури відбувається підвищення ударної в'язкості на 52-55 % порівняно з ударною в'язкістю епоксикомпозитних матеріалів, які структурували за кімнатної температури. Підвищення тривалості структурування до 2 год за температури 120 °С сприяє формуванню епоксикомпозитного матеріалу, ударна в'язкість якого становить 6,2-6,4 кДж/м².

Високу стійкість до впливу динамічних навантажень можливо досягнути за рахунок формування матеріалу з підвищеним вмістом волокнистого наповнювача (80 мас.ч.), який перебуває у стисненому стані в епоксиполімерній матриці. Ударна в'язкість таких епоксикомпозитних матеріалів становить 9,2-9,7 кДж/м², що вище на 32-34 % порівняно з ударною в'язкістю ненаповненого модифікованого кремнійорганічним модифікатором епоксиполімеру.

Встановлено, що модифікування структури епоксиполімерів кремнійорганічним лаком КО-915Б забезпечує підвищення ударної в'язкості до 6,2-6,4 кДж/м² за рахунок формування просторової сітки з підвищеною гнучкістю сегментів макромолекул, що дозволяє епоксиполімеру поглинати частину динамічної енергії. Введення скловолокон в оптимальній кількості (80 мас.ч.) додатково підвищує стійкість до динамічних навантажень завдяки появі перешкод на шляху переміщення тріщини, що призводить до додаткової витрати енергії для поширення тріщини та забезпечує підвищення ударної в'язкості на 30-35 %.

1. Савчук П.П., Отченашенко О.А., Гулай О.І. (2013). Вплив природи кремнійорганічного модифікатора і умов тверднення на властивості епоксидних композитів. Наукові нотатки, 32, 5-9.

2. Kashytskyi V. P., Sadova O. L., Klymovets O. B. (2023). Technology of forming modified epoxy composite coatings for the protection of oil and gas complex structures. Journal of hydrocarbon power engineering, 9(2), 53-61. DOI: [https://doi.org/10.31471/2311-1399-2022-2\(18\)-53-61](https://doi.org/10.31471/2311-1399-2022-2(18)-53-61)

3. Cevahir A. (2017). Glass fibers. In book: Fiber Technology for Fiber-Reinforced Composites. DOI: [10.1016/B978-0-08-101871-2.00005-9](https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101871-2.00005-9)

УДК 398.3

ОПТИЧНІ ЯВИЩА В АТМОСФЕРІ ЗЕМЛІ

Х.П. Чикеренда, С.А. Федосов

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

Для променів світла, що йдуть від Сонця або інших небесних світил, земна атмосфера являє собою своєрідну оптичну систему з постійно змінними параметрами, забезпечуючи освітленість земної поверхні, в певних умовах, розкладає на складові і викривляє хід променів, викликаючи, тим самим, різні атмосферні явища.

Природа виникнення оптичних явищ є наслідком заломлення, дисперсії, дифракції, рефракції світла та пов'язані із розсіюванням сонячного світла. При проходженні променів Сонця через атмосферу частина прямої сонячної радіації поглинається молекулами повітря, розсіюється та відбивається. У результаті цього в атмосфері спостерігаються різні оптичні явища, які сприймаються безпосередньо нашим оком. До числа таких явищ відносяться: веселка, гало, міражі, полярне сяйво, колір неба та ін.

Гало. Під явищем гало розуміються світлі або веселкові кола, які іноді спостерігаються навколо Сонця чи Місяця. Гало буває в тому випадку, коли ці небесні тіла доводиться бачити

через легкі і перисті хмари або через пелену туману, що складається з зважених в повітрі крижаних голочок. Явище гало відбувається внаслідок заломлення в крижаних кристаликах і відображення від їх граней сонячних променів.

Колір неба – це розсіяне сонячне світло. Центрами розсіювання служать самі молекули повітря – кожна окремо. Звичайно, дуже слабким розсіюванням, але достатнім, щоб шар товщиною в багато кілометрів мав синій колір. Всім добре відомо, що колір неба в залежності від стану атмосфери змінюється. Ясне безхмарне небо вдень має блакитний колір. Цей колір неба зумовлений тим, що в атмосфері багато розсіяної сонячної радіації, в складі якої переважають короткі хвилі, які сприймаються нами як блакитні або сині. Якщо повітря запилене, то змінюється спектральний склад розсіяною радіації, послаблюється синява неба; небо стає білим. Чим більша каламутність повітря, тим слабкіша синява неба.

Веселка – це атмосферне оптичне і метеорологічне явище, що спостерігається при освітленні Сонцем (іноді Місяцем) безлічі водяних капель (дощу або туману). Веселка виглядає як різнокольорова дуга або коло, що складається з кольорів спектра (від зовнішнього краю: червоний, оранжевий, жовтий, зелений, блакитний, синій, фіолетовий), що є безперервним, бо кольори переходять один в одного через безліч проміжних відтінків. Веселка виникає через те, що сонячне світло заломлюється і відбивається краплинами води (дощу або туману), ширяючими в атмосфері, які по-різному відхиляють світло різних кольорів (показник заломлення води для більш довгохвильового (червоного) світла менше, ніж для короткохвильового (фіолетового), тому слабніше усього відхиляється червоне світло - на $137^{\circ}30'$, а сильніше усього фіолетовий - на $139^{\circ}20'$). У результаті біле світло розкладається в спектр (відбувається дисперсія світла). Спостерігач, який стоїть спиною до джерела світла, бачить різнокольорове свічення, яке виходить з простору по концентричних колах (дугам).

Іноді можна побачити ще одну, менш яскраву райдугу навколо першої. Це повторна райдуга, яка освічена світлом, відображеним в краплинах два рази. У повторній райдузі «обернений» порядок кольорів – зовні знаходиться фіолетовий, а всередині червоний.

Полярне сяйво (північне сяйво) – свічення (люмінесценція) верхніх шарів атмосфер планет, що володіють магнітосферою, внаслідок їх взаємодії із зарядженими частинками сонячного вітру, тобто це прояв іонізації атмосфери. Дане явище відбувається в результаті світіння розріджених шарів атмосфери, на висоті 60-1000 км під дією сонячного вітру. Заряджені частинки потрапляють в атмосферу з космосу і під дією магнітного поля Землі спрямовуються до північного або південного магнітного полюса, де вони входять у верхні шари атмосфери, взаємодіють з розрідженими газами атмосфери і змушують їх випромінювати видиме світло.

У спектрі полярних саяв Землі найбільш інтенсивне випромінювання основних компонентів атмосфери – азоту і кисню, при цьому спостерігаються їх лінії випромінювання як в атомарному, так і молекулярному (нейтральні молекули і молекулярні іони) стані. Спектральне дослідження показує, що зелене і червоне свічення належить збудженим атомам кисню, інфрачервоне і фіолетове - іонізованим молекулам азоту. Крім того, ці чинники зумовлюють і форму полярних саяв - розмита верхня і досить різка нижня межі.

При спостереженні з поверхні Землі полярне сяйво виявляється у вигляді загального швидко змінного свічення неба або рухомих променів, смуг, корон, «завіс». Тривалість полярних саяв складає від десятків хвилин до декількох діб. Під час саяв в атмосфері Землі виникають вихрові електричні струми, захоплюючи великі області. Вони збуджують додаткові нестійкі магнітні поля, так звані магнітні бурі. Атмосфера випромінює рентгенівські промені, які, мабуть, є результатом гальмування електронів в атмосфері. Інтенсивні спалахи саява часто супроводжується звуками, що нагадують шум, тріск. Полярні саява викликають сильні зміни в іоносфері, що в свою чергу впливає на умови радіозв'язку.

Міраж – оптичне явище в атмосфері: відображення світла межею між різко різними по густині шарами повітря. Для спостерігача таке відображення полягає в тому, що разом з віддаленим об'єктом (або дільницею неба) видно його уявне зображення, зміщене відносно.

Тобто міраж – не що інакше, як гра світлових променів. Справа в тому, що в пустелі земля прогрівається дуже сильно. Але при цьому температура повітря над землею на різних від неї відстанях дуже коливається.

Всі закони фізики свідчать: світло в однорідному середовищі розповсюджується прямолінійно. Однак, при таких екстремальних умовах, закон не діє. Промені при таких різницях температур починають заломлюватися, а біля землі взагалі починають відбиватися, створюючи ілюзії, які ми звикли називати міражами. Тобто повітря біля земної поверхні стає дзеркалом. Хоч міражі прийнято асоціювати з пустелями, їх дуже часто можна спостерігати над водною поверхнею, в горах, а іноді навіть у великих містах. Іншими словами, скрізь, де виникає різкі зміни температур, можна спостерігати ці казкові картини.

Фізична природа світла цікавила людей завжди, адже природні оптичні явища дуже красиві і різноманітні. Світловий промінь, підданий різним технічним впливам, став застосовуватися в науці і техніці в діапазоні від ріжучого інструмента, здатного з точністю до мікрона обробити потрібну деталь, до невагомого каналу передачі інформації з, практично, невичерпними можливостями.

Але, перш ніж затвердився сучасний погляд на природу світла, і світловий промінь знайшов своє застосування в житті людини, були виявлені, описані, науково обґрунтовані і експериментально підтверджені оптичні явища, що виникають в атмосфері землі, від відомої кожному веселки, до складних, періодичних міражів. Але, не дивлячись на це, гра світла завжди залучала і залучає людину. Нікого не залишає байдужим ні споглядання зимового гало, ні широкого, в підлогу неба, смуги північного сяйва, ні скромної місячної доріжки на водній гладі. Світловий промінь, проходячи крізь атмосферу нашої планети, не просто освітлює її, але і додає їй неповторного вигляду, роблячи прекрасною і ми можемо із задоволенням помічати в повсякденному житті веселку, що мигтіла в небі, виїжджати на північ помилуватися полярним сяйвом і з цікавістю відмічати таємничий міраж, що мигтів в пустелі.

1. Білий М.У., Скубенко А.Ф. Полярне сяйво : Загальна фізика. Оптика. К. : Вища школа, 1987.

2. Гончаренко С.У. Фізика. 10 клас. К. : Освіта, 1996.

УДК 538

TAILORING THE CHEMICAL BONDING OF Sb_2Te_3 THIN FILMS

K. Shportko¹, S. Cremer², A. Lotnyk²

¹V.E. Lasharyov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, Nauki av., 41, Kyiv, Ukraine, k.shportko@ukr.net

²Leibniz Institute of Surface Engineering, Permoser str. 15, 04318 Leipzig, Germany, andriy.lotnyk@iom-leipzig.de

Phase change materials (PCM) are distinguished class of chalcogenides which attract increasing attention due to their unique combination of properties. The crystalline phase of PCM is characterized by a special chemical bonding mechanism [1], [2]. Ge-Sb-Te (GST) alloys relate to phase change materials and their optical and electrical properties drastically change upon crystallization, which can be extremely rapid and can occur in less than 100 ns in this class of materials [3].

In this work we were focused on the Sb_2Te_3 which is one of prototype PCM. We study effect of the Sb_2Te_3 film thickness on its chemical bonding.

The set of Sb_2Te_3 thin films with the thickness range from 3 nm to 150 nm has been obtained using PLD technique. Thin films were crystalline as-deposited. The complex dielectric function of Sb_2Te_3 thin films was determined by means of the FTIR transmittance measurements in the 0.01 to 1 eV range and the spectroscopic ellipsometry in the 0.7 to 5 eV range at 300 K.

Dielectric function of Sb_2Te_3 has been constructed using contribution of the bonded electrons, free charge carriers, inter-band electron transitions, and defect states' absorption. We performed analysis of the data in the same way, as in [4]. To indicate the effect of film thickness on the chemical bonding, we probed variations of the high-frequency dielectric constant ϵ_{inf} , maximum value of the imaginary part of the DF in range of electron inter-band transitions $\epsilon_{2\text{max}}$, optical bandgap E_g , Urbach energy E_u , and Tac parameter $B^{1/2}$.

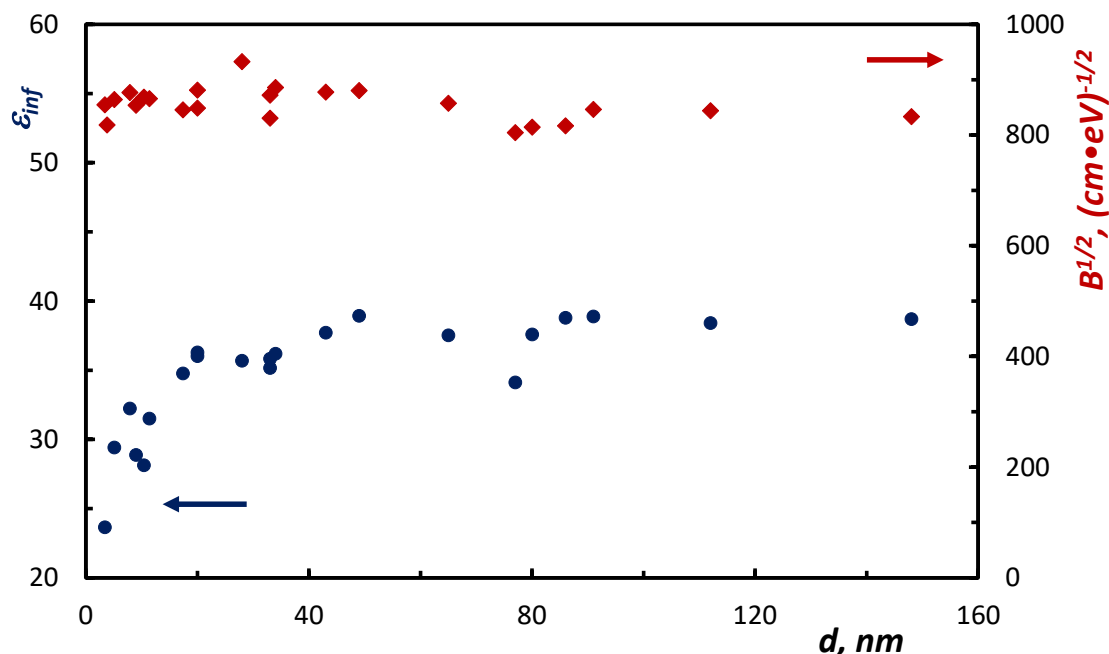


Fig. 1. Dependence of the the high-frequency dielectric constant ϵ_{inf} and Tauc parameter $B^{1/2}$ on the Sb_2Te_3 film thickness.

The dependence of the Tauc parameter $B^{1/2}$ does not indicate any significant variations of the long-range order upon increase the film thickness (Fig.1). At the same time, we observed increase in the high-frequency dielectric constant ϵ_{inf} , maximum value of the imaginary part of the DF in range of electron inter-band transitions $\epsilon_{2\text{max}}$, Urbach energy E_u , and decrease in the optical bandgap E_g , which relate to the chemical bonding effects.

These results show that the effects of the chemical bonding in crystalline Sb_2Te_3 can be tuned by layer thickness.

1. K. Shportko, S. Kremers, M. Woda, D. Lencer, J. Robertson, and M. Wuttig, "Resonant bonding in crystalline phase-change materials," *Nat Mater*, vol. 7, no. 8, pp. 653–658, Aug. 2008, doi: 10.1038/nmat2226.
2. M. Zhu *et al.*, "Unique Bond Breaking in Crystalline Phase Change Materials and the Quest for Metavalent Bonding," *Advanced Materials*, vol. 30, no. 18, p. 1706735, May 2018, doi: 10.1002/adma.201706735.
3. S. R. Ovshinsky, "Reversible Electrical Switching Phenomena in Disordered Structures," *Physical Review Letters*, vol. 21, no. 20, pp. 1450–1453, Nov. 1968, doi: 10.1103/PhysRevLett.21.1450.
4. K. V. Shportko, "Disorder and compositional dependences in Urbach-Martienssen tails in amorphous $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ alloys," *Sci Rep*, vol. 9, no. 1, pp. 6030.1-6030.9, Dec. 2019, doi: 10.1038/s41598-019-42634-8.

PACS: 81.07 –b; 85.40. Sz

ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ GeSn ТА GeSn:C ПЛІВОК НА Si ПІДКЛАДКАХ

**В. Юхимчук¹, О. Капуш¹, О. Гудименко¹, Н. Мазур¹, О. Оберемок¹, Т. Сабов¹,
О. Дубіковський¹, В. Єфанов¹, О. Кульбачицький¹, О. Косуля¹, Б. Романюк¹**

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,
45 пр. Науки, 09028, Київ, Україна, yukhym@isp.kiev.ua

На сьогодні більше 90% всієї електроніки в світі базується на Si технології, водночас, саме для неї існує проблема, яка пов'язана з непрямозонністю Si. Останнє не дозволяє виготовляти ефективні випромінювачі/поглиначі, зокрема, які є необхідною ланкою в ланцюгу передачі та реєстрації оптичних сигналів в електронних мікросхемах, сформованих на основі КМОН технології. Перспективним напрямком подолання цієї проблеми є формування на Si підкладках Ge_{1-x}Sn_x плівок, електронна структура яких при певному значенні x (6 - 9 %) [1-3] стає прямозонною. Відмінності у визначенні долі Sn в Ge_{1-x}Sn_x, при якій відбувається перехід з непрямозонної до прямозонної електронної структури, зумовлені наявними в Ge_{1-x}Sn_x плівках механічними напруженнями. Зазначимо, що при формуванні Ge_{1-x}Sn_x плівок відбувається не тільки зміна параметрів ґратки і модифікація електронної структури в порівнянні з чистим Ge, але і розширюється їх чутливість в довгохвильову спектральну область.

Створення кристалічних Ge_{1-x}Sn_x плівок з відносно високим вмістом $x \geq 6\%$ є досить складною задачею, оскільки для Sn характерна мала розчинність (< 1 %) в Ge. Останнє зумовлено значно більшим ковалентним радіусом атомів Sn (162 пм) в порівнянні з Ge (137 пм). При вбудовуванні атомів Sn в кристалічну ґратку Ge виникають локальні напруження, які при певній концентрації Sn призводять до їх сегрегації. Як правило, GeSn плівки з високим вмістом олова отримують нерівноважним методом молекулярно-променевої епітаксії. Однак цей метод є дорогорітсним і використовується переважно для створення лабораторних зразків. Щоб реалізувати вбудовування атомів Sn в Ge ґратку методом магнетронного розпилення відповідних мішеней, необхідно компенсувати локальні механічні напруження, які при цьому виникають в плівці.

Основною ідеєю наших досліджень є компенсація локальних напружень додатковим інкорпоруванням в Ge плівку атомів С, які мають суттєво менший (91 пм) ковалентний радіус в порівнянні з радіусами в Sn і Ge. Одночасне вбудовування в Ge ґратку атомів Sn та С повинно компенсувати локальні напруження, що виникають при вбудовуванні тільки атомів Sn, і збільшити при цьому розчинність атомів олова в Ge. Тому метою цієї роботи було дослідження впливу імплантації іонів вуглецю в Ge/Sn шари на ефективність вбудовування атомів Sn в кристалічну ґратку Ge в процесі термічних та швидких фотонних відпалів. Для отримання GeSn плівки на Si підкладці магнетронним напиленням формували 100 нм Ge буферний шар, на який осаджували 200 нм GeSn плівку. Після напилення плівки пластина розрізалася на 2 частини, в одну з яких імплантувалися іони вуглецю з енергією 50 кеВ та дозою 1000 мкКл, а інша використовувалася для порівняння при наступних дослідженнях. Сформовані таким чином зразки відпалювалися двома методами: 1) термічним в атмосфері Ar в діапазоні температур 250 – 500 °С, а час варіювався від 30 хвилин до 8 годин та 2) фотонним, протягом 60 сек. Сформовані плівки досліджувалися методами мас-спектроскопії, Х-променевої дифрактометрії та раманівської спектроскопії. Х-променева дифрактометрія та раманівська спектроскопія показали, що не відпалені плівки є аморфними. Відпал обох типів плівок при 250 °С не приводить до їх кристалізації. Відпал при 300 °С приводить до кристалізації тільки GeSn плівки, в яку не імплантували іони С. Відпал при 350 °С приводить до кристалізації обох типів плівки. Відмінності у температурі кристалізації імплантованої та неімплантованої плівок можуть бути пов'язані з тим, що імплантація іонів призводить до

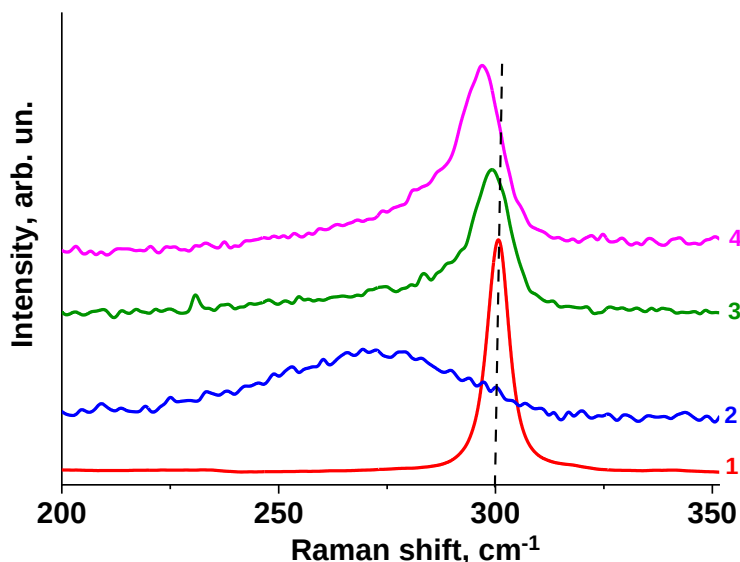


Рис. 1. Раманівські спектри чистого германію (крива 1), вихідної GeSn плівки (крива 2), плівки GeSn (крива 3) та GeSn:C (крива 4), відпалених при 350 °С.

суттєвого перемішування Ge, Sn та С атомів в плівці та необхідності більшої енергії для вбудовування атомів вуглецю в Ge ґратку.

На рис. 1 приведено раманівські спектри чистого германію (крива 1), вихідної GeSn плівки (крива 2), плівки GeSn (крива 3) та GeSn:C (крива 4), відпалених при 350 °С. Як видно зі спектрів частотне положення Ge-Ge коливної моди (299 см⁻¹) в GeSn плівці (крива 3) зміщене в низькочастотний

бік по відношенню до частоти відповідної коливної моди чистого германію (300,5 см⁻¹), а її напівширина зростає. Збільшення напівширини Ge-Ge смуги зумовлені зменшенням часу життя фононів в GeSn ґратці, в порівнянні з Ge ґраткою, а зміщення її в низькочастотний бік впливом вбудованих в кристалічну ґратку атомів Sn на силові константи Ge-Ge коливань та порушенням просторової симетрії Ge ґратки. Імплантація іонів вуглецю в GeSn плівку та наступний її відпал при 350 °С приводить до ще більшого зсуву Ge-Ge смуги в низькочастотний бік. Її частотне положення становить 296,6 см⁻¹. Такі зміни свідчать, що одночасне вбудовування атомів Sn та С в Ge ґратку сприяє зменшенню локальних напружень, зумовлених дисторсією Ge ґратки при інкорпорації в неї тільки одного типу атомів. В результаті термічних та фотонних відпалів при температурах вище 350 °С відбувається кристалізація GeSn плівки, а атоми Sn практично не випадають в осад до температури 500 °С. Таким чином, підтверджено ефективність ідеї про збільшення розчинності атомів Sn в Ge ґратці при одночасній інкорпорації в неї атомів олова та вуглецю.

Робота виконана за підтримки НФДУ, проєкт № 2023.03/0186.

1. S. Biswas, J. Doherty, D. Saladukha, Q. Ramasse, D. Majumdar, M. Upmanyu, A. Singha, T. Ochalski, M.A. Morris & J.D. Holmes. Non-equilibrium induction of tin in germanium: towards direct bandgap Ge_{1-x}Sn_x nanowires // Nature communications (2016). DOI: 10.1038/ncomms11405.
2. M. Oehme, D. Buca, K. Kostecky, S. Wirths B. Holländer, E. Kasper, J. Schulze. Epitaxial growth of highly compressively strained GeSn alloys up to 12.5% Sn. // Journal of Crystal Growth. 384 (2013) 71–76.
3. J. Zheng, Z. Liu, C. Xue, C Li, Yu. Zuo, B. Cheng, and Q. Wang. Recent progress in GeSn growth and GeSn-based photonic devices // J. Semicond. (2018), 39(6).

УДК 539.264:543.427.3:544.6.076.324.4:620.93

ВПЛИВ ТРИВАЛОСТІ МЕХАНІЧНОЇ ОБРОБКИ $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ НАНОКОМПОЗИТУ НА ПОТЕНЦІОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛІТІЄВИХ АКУМУЛЯТОРІВ

Ю. В. Яворський¹, А.Б. Груб'як², О. І. Дудка¹

¹ Інститут матеріалознавства та зварювання імені Є. О. Патона Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», вулиця Політехнічна 35, Київ 03056, Україна, yar-yra@ukr.net.

² Інститут металофізики імені Г.В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка Вернадського, 36, Київ 03142, Україна.

Як було показано в роботах [1-5] механічна обробка впливає на різні структурні характеристики композитів на основі нанорозмірних оксидів. Крім того змінюючи термін механічної обробки можна змінювати інтенсивність впливу на структуру і відповідно властивості таких наноконкомпозитів [5]. Проте залежність зміни цих параметрів від терміну обробки не є лінійною. Однією із основних характеристик літійових джерел енергії є збереження характеристик при циклюванні. А одним із перспективних наноконкомпозитів є $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ [4]. Тому для визначення можливості використання отриманих наноконкомпозитів у якості цикльованих літійових джерел енергії проведено дослідження електрохімічних характеристик при потенціодинамічному (ЦВА) циклюванні (30 потенціодинамічних циклах ЛДС зі швидкістю 3 мВ/с) та потенціодинамічне циклювання при різних швидкостях сканування (1-50 мВ/с).

Для вихідної суміші при циклюванні спостерігається поступове згасання розрядних ємнісних процесів, що виражається у звуженні та зменшенні інтенсивності розрядної гілки кривих ЦВА. Крім того, після 10 циклів заряду/розряду видимий максимум розряду при 1,5 В зникає. Надалі ступінь затухання розряду зменшується. Гілки заряджання катода є оборотними під час циклічного циклу, що вказує на відновлення накопиченої на поверхні ємності під час процесу заряджання. Подібна тенденція спостерігається для композитів після 3 і 5 хв обробки, оскільки процеси розряду оборотні, і відображено поступове загасання ємнісного розряду. Катодний матеріал після 5-ти хвилин має хорошу циклічну здатність і найменше ємнісне загасання. Для наступних зразків, отриманих при більшій тривалості механічної обробки, спостерігається оборотність заряду/розряду.

Узагальнюючи результати ЦВА досліджень, можна побачити, що термін механоактивація визначає здатність сформованих композитів бути електрохімічно активними. Це зумовлено насамперед структурно-морфологічними змінами, яких зазнає матеріал у процесі обробки, а саме ущільненням структури та утворенням агломератних комплексів [6, 7]. Електрохімічна активність композитів зумовлена розрядними інтеркаляційними процесами необоротного введення іонів літію в структуру суміші $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ та ємнісним накопиченням заряду на електрохімічно активній поверхні композиту, ймовірно, шляхом реакцій хемосорбції на матеріалі катод /електроліт. Під час заряджання відбувається повільна деінтеркаляція іонів літію зі структури катодного матеріалу та швидкі процеси десорбції з поверхні, що спричиняє часткову оборотність циклу заряд/розряд.

1. Effect of mechanical treatment on distribution of valence electrons and characteristics of lithium current sources in nanocomposite $(\text{SiO}_2)_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$ ($x=0.8$, $x=0.7$) cathode / Ya.V. Zaulichnyy, V.M. Gun'ko, Y.V. Yavorskyi, I.M. Gasyuk, N. Wanderka, O.I. Dudka // Applied Surface Science 494 (2019) 1013–1022. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.07.206>.

2. The Dependence between the structural-morphological features mixes $0.8\text{SiO}_2/0.2\text{Al}_2\text{O}_3$ from the time of mechanical treatment / Yu.V. Yavorsky, Ya.V. Zaulichny, M.V.

Karpets, A.I. Dudka, A.B. Hrubciak, V.V. Moklyak // Physics and Chemistry of Solid State, V. 22, No. 3 (2021) pp. 516-521. <https://doi.org/10.15330/pcss.22.3.516-521>.

3. Effect of mechanical treatment on distribution of valence electrons and characteristics of lithium current sources in nanocomposite $(\text{SiO}_2)_x(\text{Al}_2\text{O}_3)_{1-x}$ ($x=0.8$, $x=0.7$) cathode / Ya.V. Zaulichnyy, V.M. Gun'ko, Y.V. Yavorskyi, I.M. Gasyuk, N. Wanderka, O.I. Dudka // Applied Surface Science 494 (2019) 1013–1022. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.07.206>

4. Yu.V. Yavorsky, Ya.V. Zaulichnyy, V.M. Gunko, M.V. Karpets, V.V. Mokliak. The dependence between the structural-morphological features mixes $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ and discharge capacities of lithium power sources // Journal Of Nano- And Electronic Physics – 2019. – 11 (6). – 060012 - 060018. [https://doi.org/10.21272/jnep.10\(6\).06012](https://doi.org/10.21272/jnep.10(6).06012)

5. Y.V. Yavorskyi, A.B. Hrubciak, Ya.V. Zaulichnyy et al. Influence of machining duration of $0.8\text{SiO}_2/0.2\text{Al}_2\text{O}_3$ nanopowder on electrochemical characteristics of lithium power sources. // Applied Surface Science. – 2023. – 617. – 156420 <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.156420>

6. Impact of mechanical treatment duration on the structure of nanopowder composite $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ / Y. V. Yavorskyi, M. V. Karpets, A.B. Hrubciak, O. I. Dudka, Tiancheng An, Yulong Guo / 8th International Materials Science Conference HighMatTech-2023, October 2-6, 2023, Kyiv, Ukraine, p. 102.

7. The effect of the mechanical duration on the electronic structure $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$ nanocomposite / Yurii Yavorskyi, Tianchang An, Yulong Gou, Yaroslav Zaulichnyy // XIX International Freik Conference On Physics And Technology Of Thin Films And Nanosystems, Ivano-Frankivsk, October, 09-14, 2023, p. 82.

UDC 539.2:546:641

**ELECTRONIC STRUCTURE OF CuWO_4 AND WO_{3-x} NANOCRYSTALS AS
DETERMINED FROM X-RAY SPECTROSCOPY STUDIES AND FIRST-PRINCIPLES
FP-LAPW BAND-STRUCTURE CALCULATIONS
O. Yakymchuk, O. Khyzhun, V. Bekenev, Y. Solonin**

*Frantsevykh Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine,
3 Krzhyzhanovsky Str., Kyiv 03142, Ukraine*

Tungsten oxides, WO_{3-x} , and tungstates with a common formula MWO_3 are considered as very prospective materials for photocatalytic water splitting with generation of hydrogen and oxygen [1,2]. Tungstates in the form of crystals and films reveal interesting optical, electrochromic, and gas-sensing properties [3]. Many tungstates show interesting nonlinear optical properties to be suitable hosts for lasing ions [4]. Photocatalytic and optical properties of tungstates are found to be a complex function of their phase composition and the electronic structure [4].

In the present work, we report on complex experimental and theoretical studies of the electronic structure of monoclinic and hexagonal forms of WO_{3-x} and CuWO_4 tungstate crystallizing in the triclinic crystal structure. For the experimental studies, we employ X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and X-ray emission spectroscopy (XES) methods. For these compounds, we have measured XPS valence-band and core-level spectra and XES O $K\alpha$ and W $L\beta_5$ bands giving information on the energy distributions of O 2p and W 5d states, respectively. Band-structure calculations of these compounds have been made within density functional density (DFT) framework using a full-potential linearized augmented-plane wave (FP-LAPW) method as implemented in the WIEN97 package. Results of the present experimental XPS and XES studies of the electronic structure of WO_{3-x} and CuWO_4 nanocrystals are in excellent agreement with the theoretical FP-LAPW band-structure calculations.

In particular, the present experimental results indicate that the half-width of the XPS valence-band spectra are somewhat bigger for hexagonal WO_{3-x} oxides as compared to those of substoichiometric monoclinic WO_{3-x} oxides. Increasing the half-widths of those spectra could be explained by the fact that two types of oxygen atoms are distinguished in the structures of hexagonal WO_{3-x} : the atoms belonging to the hexagonal planes and those positioned between the planes. The results indicate that, O 2p states originating from the atoms in the hexagonal planes give the main contributions in the lower part of the XES O $K\alpha$ band, while the states originating from the atoms positioned between the planes dominate its top. The present experimental data allow for conclusion that the effective positive charge states of W atoms do not change when changing the structure motif of WO_{3-x} oxides; they depend strongly on the oxygen contents in the oxides. The formation of an additional near-Fermi subband, which is absent in the both monoclinic and hexagonal forms of tungsten trioxide and copper tungstate CuWO_4 , was detected on the XPS valence-band spectra of substoichiometric WO_{3-x} oxides. The creation of this sub-band is caused by the W 5d and W 6s states taking part in the formation of the W-W bonds in the substoichiometric WO_{3-x} compounds.

Results of the present FP-LAPW band-structure calculations indicate that Cu 3d electronic states dominate the top of the CuWO_4 valence band. Our results indicate that CuWO_4 is an indirect-gap semiconductor (Fig. 1). From the theoretically calculated band dispersions presented in Fig. 1, it is obvious the valence band of CuWO_4 has its maximum at the Γ point (centre of the Brillouin zone), whereas the minimum of the conduction band in this tungstate is positioned at the high-symmetry Y point (0 0.5 0). The present DFT calculations indicate that, the indirect band gap in CuWO_4 is equal to about 1.999 eV. The theoretical value is somewhat smaller in comparison with the experimental estimations of the energy band gap of CuWO_4 : $E_g = 2.3$ eV [5] and $E_g = 2.06$ eV [6]. However, it is necessary mentioning that first-principles calculations made within the GGA approximation used in the present work underestimate somewhat the energy gap of semiconductors and insulators. As a result, we can consider that the value $E_g = 1.999$ eV obtained theoretically in the present FP-LAPW calculations for CuWO_4 is in good agreement with experimentally measured values for this tungstate [5,6].

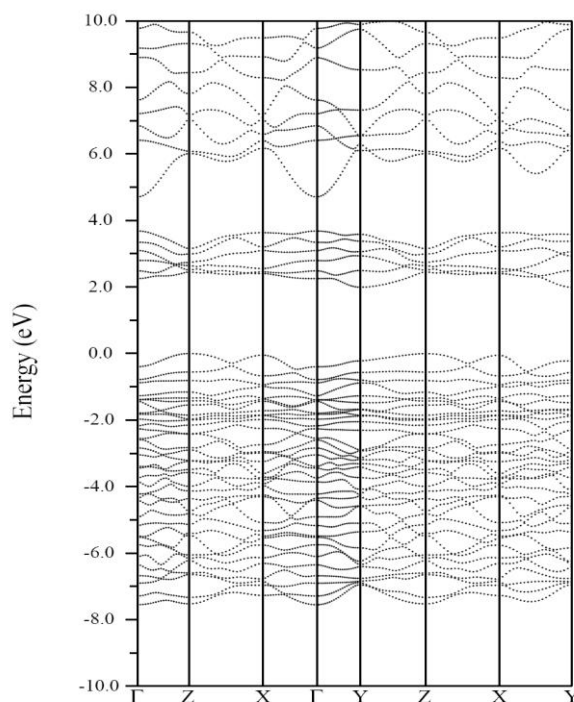


Fig. 1. Electronic bands of CuWO_4 calculated via selected high-symmetry points of the first Brillouin zone.

The present experimental results allow for statement that, the XPS W 4f core-level spectra of the monoclinic and hexagonal forms of WO_3 and CuWO_4 tungstate are simple spin-doublets with the XPS W 4f_{7/2} binding energies corresponding to those of tungsten being in the formal valence state +6. The values of the binding energies of the XPS O 1s core-level spectra in the monoclinic and hexagonal forms of WO_3 and CuWO_4 tungstate are determined to be close to those of the double $\text{KY}(\text{WO}_4)_2$ tungstate [7].

1. F.E. Osterloh, Inorganic materials as catalysts for photochemical splitting of water, *Chem. Mater.* 20 (2008) 35-54.
2. A. Kudo, Y. Miseki, Heterogeneous photocatalyst materials for water splitting, *Chem. Soc. Rev.* 38 (2009) 253-278.
3. S. Rajagopal, D. Nataraj, O.Y. Khyzhun, Y. Djaoued, J. Robichaud, D. Mangalaraj, Hydrothermal synthesis and electronic properties of FeWO_4 and CoWO_4 , *J. Alloys Compd.*, 493 (2010) 340-345.
4. V.V. Atuchin, L.D. Pokrovsky, O.Y. Khyzhun, A.K. Sinelnichenko, C.V. Ramana, Surface crystallography and electronic structure of potassium yttrium tungstate, *J. Appl. Phys.*, 104 (2008) 033518.
5. J. Ruiz-Fuertes, D. Errandonea, A. Segura, F.J. Manjón, Zh. Zhu, C.Y. Tu, Growth, characterization, and high-pressure optical structure of CuWO_4 , *High. Pres. Res.* 28 (2008) 565-570.
6. F.A. Benko, C.L. MacLaurin, F.P. Koffyberg, CuWO_4 and Cu_3WO_6 as anodes for the photoelectrolysis of water, *Matter. Res. Bulletin*, 17 (1982) 133-136.
7. V.V. Atuchin, L.D. Pokrovsky, O.Y. Khyzhun, A.K. Sinelnichenko, C.V. Ramana, Surface crystallography and electronic structure of potassium yttrium tungstate, *J. Appl. Phys.*, 104 (2008) 033518.

УДК 538.958; 539.213

СПЕКТРИ ПОГЛИНАННЯ СТЕКОЛ Ga_2S_3 - GeS_2 - Sb_2S_3 ЛЕГОВАНИХ Er та Nd

Т.К. Яцинюк¹, В.В. Галян¹, І.А. Іващенко², А.Г. Кевшин¹, В. Артюх¹

¹Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі, 13 м. Луцьк.

²Факультет хімічної інженерії та технологій, Краківський університет технологій, вул.

Варшавська 24, 31-155, Краків, Польща.

Yatsyniuk.Tetiana@vnu.edu.ua

Сірковмісні скла є широкозонними напівпровідниками, які характеризуються високою прозорістю в широкому діапазоні довжин хвиль, високим показником заломлення, малими оптичними втратами та нелінійними оптичними властивостями [1]. Крім того, вони демонструють високу термічну та механічну міцність, радіаційну стійкість і є хорошим середовищем для введення рідкісноземельних металів (РЗМ). Завдяки цим важливим властивостям халькогенідні стекла широко використовуються як компактні оптичні волокна, безконтактні сенсори, оптичні підсилювачі та фотоелектроди.

Сульфідні стекла, леговані РЗМ, дуже привабливі як світловипромінювальні середовища завдяки своїм оптичним властивостям і низькій енергії фононів, що призводить до зниження ймовірності безвипромінювальних переходів і втрат енергії. Дослідники зосереджуються на вивченні властивостей фотолюмінесценції (ФЛ) сульфідів у видимій, ближній і середній ІЧ-діапазонах, оскільки стекла є ефективним світловипромінюючим середовищем при легуванні РЗМ.

Синтез стекел проводили в кварцових ампулах, відкачуваних до залишкового тиску 0,1 Па з компонентів високої чистоти: Ga - 99,999%, Ge - 99,999%, Sb, Nd, Er - 99,99% і S - 99,997% (сірка). був попередньо очищений подвійною вакуумною дистиляцією). Синтез зразків

проводили прямим одотемпературним методом в печі шахтного типу. На першому етапі нагрівання здійснювалось зі швидкістю 10 К/год до 400 К (48 год відпалу), надалі нагрівали до 720 К (48 год відпалу) і, до максимальної температури 1210 К (2 год відпалу). Зразки гартували в насиченому розчині солі з колотим льодом.

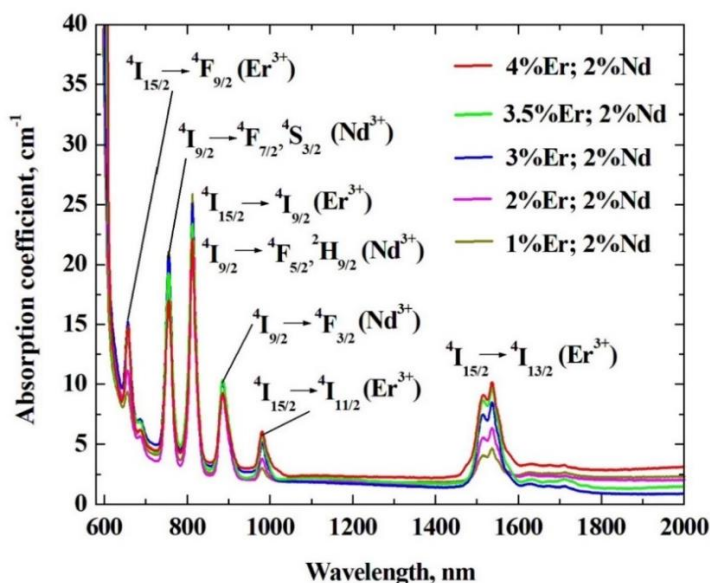


Рис. 1. Спектри оптичного поглинання для
стекол

пов'язаних з іонами ербію.

Досліджено спектри оптичного поглинання стекол 20 мол. % Ga₂S₃ – 60 мол. % GeS₂ – 20 мол. % Sb₂S₃, подвійно легованих Er і Nd в діапазоні 550 – 2000 нм при кімнатній температурі (рис. 1). Край оптичного поглинання стекол знаходиться при 600 нм і не змінюється суттєво при додаванні Er і Nd. Зразки мають високу прозорість у спектральному діапазоні 700 – 2000 нм. Крім того, зареєстровано вузькі смуги поглинання з максимумами при 655, 755, 810, 885, 980 та 1540 нм, що відповідають переходам у f-оболонці іонів Er³⁺ та Nd³⁺. Із збільшенням вмісту Er зростає інтенсивність смуг поглинання

1. V. V.Halyan, V. O. Yukhymchuk, Ye. G. Gule,[and others].Photoluminescence features and nonlinear-optical properties of the Ag_{0.05}Ga_{0.05}Ge_{0.95}S₂–Er₂S₃ glasses, Opt. Mater.90 (2019) 84–88.

Секція 2. Новітні фізичні та хімічні методи дослідження і технології

PACS 07.85.Jy, 42.65.Dr, 76.30.-v, 81.15.-z

ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ ГІДРОКСИЛАПАТИТНИХ ПЛІВОК НА ТИТАНОВИХ ТА ПОЛІМЕРНИХ ПІДКЛАДКАХ

О.Є. Бєляєв¹, М.Я. Валах¹, І.П. Ворона¹, О.Й. Гудименко¹, В.Б. Лозинський¹,
Ю.М. Насєка¹, В.П. Темченко¹, П.М. Болтавець¹, В.О. Юхимчук¹

¹Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України, 03028,
проспект Науки 41, Київ, Україна

На сьогодні наявний великий інтерес до розробки медичних імплантатів, що обумовлено величезною потребою таких виробів в усьому світі [1]. Найбільшого поширення набули імплантати виготовлені на основі титану та його сплавів. Однак, не дивлячись на їх відносну біосумісність, достатньо часто виникають запальні процеси після їх імплантації в людський організм [2]. Цю проблему можна вирішити осадженням на поверхню імплантатів біосумісних покриттів, як правило, фосфатів кальцію (ФК), які є близькими за своєю складовою до кісток, зокрема це такі сполуки як гідроксилапатит (хімічна формула – $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) та трикальцій фосфат (хімічна формула – $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$). Покриття металевих імплантатів здійснюється різними технологічними методами. Водночас варто зазначити, що існуючі методи нанесення таких покриттів мають як переваги, так і суттєві недоліки, які пов'язані з якістю сформованих покриттів та їх вартістю [3]. Тому постійно йде пошук нових методів осадження біосумісних покриттів з високими експлуатаційними характеристиками та низькою собівартістю.

В нашій роботі запропоновано метод газово-детонаційного осадження (ГДО) ФК на титанові та полімерні підкладки. Його суть полягає в прискоренні частинок вихідного порошку ФК детонаційною хвилею, яка виникає в результаті вибуху суміші пропану з киснем. Частинки порошку ФК вводяться в детонаційну хвилю, прискорюються до швидкостей, що в кілька разів (~5) перевищують швидкість звуку, і в результаті їх взаємодії (удару) з поверхнею підкладки, на ній формується захисне біотолерантне покриття. Головні переваги цього методу перед іншими - це висока продуктивність, можливість наносити шари різної товщини на підкладки великої площі (до кількох m^2), однаковість товщини та усереднених характеристик покриття з різних сторін імплантату; можливість в широких межах варіювати склад покриття; висока адгезія покриття до підкладки. В процесі виконання роботи вирішувалися наступні задачі: 1) розробити процес осадження ГАП на полімерні підкладки (поліетеретеркетон (ПЕЕК)), хімічна формула – $\text{C}_{19}\text{H}_{14}\text{O}_3$ та порівняти параметри сформованих на них покриттів з відповідними характеристиками покриттів на титані; 2) сформувати ГАП покриття із прекурсорів в процесі ГДО; 3) пролегувати ГАП покриття сріблом для формування в них антибактеріальних властивостей. Особливістю ГДО ГАП на полімерні підкладки є те, що при технологічних умовах, оптимальних для формування покриття на титані, відбувається плавлення ПЕЕК. Це зумовлено тим, що теплопровідність ПЕЕК майже на 2 порядки менша в порівнянні з титаном, а температура плавлення становить 320°C . Щоб вирішити цю проблему варіювалися технологічні параметри осадження (енергія вибуху, відстань до підкладки), при яких була б висока адгезія ГАП на ПЕЕК, а останній ще не плавиться. Дослідження методами раманівського розсіювання та рентгенівської дифрактометрії сформованого покриття на ПЕЕК засвідчили, що воно складається переважно з ГАП з включеннями вторинних фаз – трикальційфосфату (ТКФ) та дефектного оксиапатиту. Причому під час нанесення покриття утворюється перехідний шар із підвищеним вмістом вищезазначених вторинних фаз між НАР та РЕЕК підкладкою. Виникнення вторинних фаз було пояснено взаємодією мікрочастинок ГАП, розігнаних до надзвукових швидкостей, з матеріалом підкладки. Додаткові дослідження

покриттів ГАП, сформованих на підкладках з інших матеріалів, показали пряму залежність між вмістом вторинних фаз і твердістю підкладки, а також її теплопровідністю. Зазначимо, що

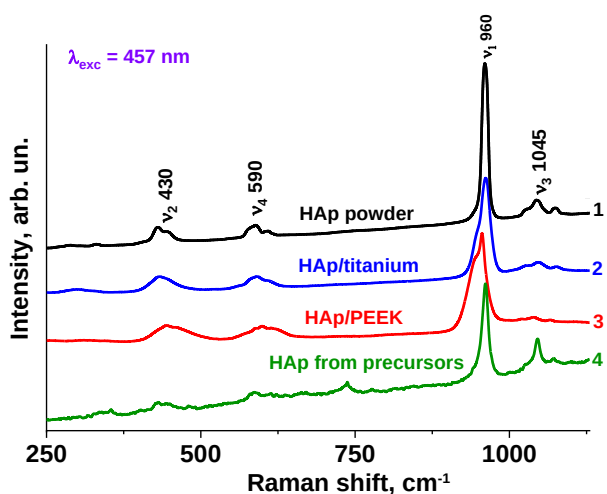


Рис.1. Раманівські спектри ГАП порошку (крива 1) та його покриттів на Ті (крива 2) та КЕЕР (крива 3) підкладках та після синтезу ГАП з прекурсорів з додатковим відпалом при 640 °С (крива 4) при збудженні спектрів випромінюванням з $\lambda = 457$ nm.

вторинні фази в покритті ГАП, нанесеному на титанові підкладки, відрізнялися від зазначених. Вони складаються з аморфного та дефектного ГАП. Інші сполуки у вторинних фазах пояснювалися різною теплопровідністю металів і полімерів – на металевих підкладках прискорені мікрочастинки ГАП швидко охолоджуються і залишаються тільки фази аморфного і дефектного кристалічного ГАП. На рис. 1 наведено раманівські спектри вихідного ГАП порошку та спектри сформованих покриттів на КЕЕР та титановій підкладках. З рис. 1 видно, що раманівські спектри від ГАП покриття на КЕЕР підкладці дещо відрізняються від спектрів від ГАП покриття на титані, а саме, частотні положення раманівських смуг дещо зміщені у височастотну сторону, що свідчить про наявність в покритті напружень стиску.

Найбільш поширеним і дешевим методом отримання ГАП є метод хімічного синтезу, згідно якого у результаті змішування у водному розчині солей-прекурсорів, таких як $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$, NH_4OH та $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, при низьких температурах (30 - 100 °С) утворюється ГАП. Іншим поширеним методом синтезу ГАП є метод твердотільних хімічних реакцій. Згідно останнього, суміш солей-прекурсорів витримується певний час при високих температурах (650 - 750 °С). Суттєвим недоліком обох методів є те, що вони є довготривалими процесами. Тому нами було запропоновано спосіб сформувати ГАП покриття підкладок безпосередньо з солей прекурсорів. Як вихідний порошок було використано суміш солей-прекурсорів $\text{Ca}(\text{OH})_2$ та $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ у молярному співвідношенні 5:3. В результаті технологічних особливостей методу, а саме розігріванні частинок порошку при формуванні покриття, відбуваються хімічні реакції, результатом яких є утворення покриття з аморфного ГАП. Подальший відпал при температурі 640 °С протягом 30 хвилин в атмосфері аргону дозволяє покращити його структурну досконалість та трансформувати аморфний ГАП в кристалічний (Рис.1, крива 4). Для надання ГАП покриттям антибактеріальних властивостей в порошок ГАП додавали AgNO_3 , причому концентрацію останнього варіювали з розрахунку зміни долі срібла в ГАП від 0.5 до 2 %. Дослідження легованих та нелегованих сріблом ГАП покриттів «диско-дифузійним» методом показали, що наявність срібла в ГАП покриттях дійсно надає їм антибактеріальних властивостей.

Робота виконана в рамках проєкту Національного фонду досліджень України № 200/0103.

1. M. Furko, C. Balázs. Calcium phosphate based bioactive ceramic layers on implant materials preparation, properties, and biological performance // Coatings. 2020. 10, No 9. P. 823.

2. Y. Sasikumar, K. Indira, N. Rajendran. Surface modification methods for titanium and its alloys

and their corrosion behavior in biological environment: A review // J. Bio- Tribo-Corros(2019) 5 36.

3. N.I. Klyui, V.S. Chorny, I.V. Zatovsky et al. Properties of gas detonation ceramic coatings and their effect on the osseointegration of titanium implants for bone defect replacement. *Ceramics International* // (2021) 47 Issue 18, 25425-25439.

УДК 621.396.6:658.562; 621.396.66, 621.315.616.95/.96; 621.315.616.97; 621.315.616-419, 535.343.2

ВПЛИВ ПРОЦЕСІВ ТРАВЛЕННЯ ПОВЕРХНІ МЕХАНІЧНО ОБРОБЛЕНОГО МОНОКРИСТАЛІЧНОГО ГЕРМАНІЮ НА ФОТОМОДУЛЯЦІЮ СУБ- ТЕРАГЕРЦОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

Б. Венгрин^{1,*}, Р. Буклів¹, А. Данилов¹, В. Гайдучок², І. Сенько¹, А. Андрущак¹

¹Національний університет «Львівська політехніка»
вул. Ст. Бандери 12, м. Львів, 79013, Україна

* bohdan.y.venhryn@lpnu.ua

²Науково-виробниче підприємство «Електрон-Карат»
вул. Стрийська 202, м. Львів, 79031, Україна

Фотомодулятори для суб-ТГц діапазону частот є важливим компонентом для систем обробки сигналів в такому частотному діапазоні. Одним із перспективних матеріалів, який використовується для фотомодуляції субтерагерцового випромінювання є монокристалічний германій [1]. Германій є ізотропним кристалом, тому його пропускання субтерагерцових хвиль не залежить від просторової орієнтації кристала. Монокристалічний германій добре піддається обробці, що дає змогу формувати із нього високоточні деталі для практичного застосування.

У роботі досліджено вплив травлення поверхні механічно обробленого монокристалічного германію на його фотомодуляційну здатність в субтерагерцовому діапазоні частот. Для досліджень були використані зразки монокристалічного германію діаметром 30 мм із різними товщинами 0,5; 1,5 та 2,3 мм.

Травлення зразків германію проводили як хімічним способом, так і з допомогою іонного травлення. Хімічне травлення здійснювали в різних травниках-окисниках, а іонне травлення виконували на установці вакуумного напилення фірми TORR. Процес хімічного травлення контролювали за зміною товщини і маси пластини германію в залежності від його тривалості.

Було вивчено вплив оптичної засвітки на пропускання субтерагерцового випромінювання з частотою 130 ГГц через виготовлені зразки монокристалічного германію до і після травлення. Засвітку зразків германію здійснювали оптичним випромінюванням з довжиною хвилі $\lambda=565$ нм і потужностями в діапазоні від 0,05 Вт/см² до 0,6 Вт/см².

У результаті проведених вимірювань було оцінено вплив процесу травлення та оптичної засвітки різної інтенсивності на пропускання германієм субтерагерцового випромінювання з частотою 130 ГГц. Одержані результати будуть використані при розробці фотомодуляторів субтерагерцового діапазону частот.

Подяка: Ця робота була виконана при підтримці Національного фонду досліджень України в рамках проекту #2021.01/0410.

1. Photo-induced spatial modulation of THz waves: opportunities and limitations. Akash Kannegulla, Md. Itrat Bin Shams, Lei Liu, and Li-Jing Cheng. *Optics Express*. 2015. V. 23 (25). P. 32098.

УДК 53.07

DESIGN AND DEVELOPMENT OF LINEAR AND MATRIX ARRAYS BASED ON SI-MOSFET DETECTORS FOR ACTIVE TERAHERTZ IMAGING

O.G. Golenkov, V.P. Reva, S.V. Korinets, A.V. Shevchik-Shekera, I.O. Lysiuk,
V.V. Zabudsky, M.V. Vuichyk, M.Yu. Kovbasa, F.F. Sizov

*V.E. Lashkaryov ISP of Ukrainian NAS, 41, pr. Nauky, 03028, Kyiv, Ukraine,
golenkov@isp.kiev.ua*

Today, imaging in the terahertz radiation range (0.1 – 10 THz) is widely presented in different sphere of applications. It can be used in the security, medicine, food inspection, studying of things internal structure, etc. The radiation in the lower frequency range of terahertz diapason (0.1 - 0.3 THz) easily penetrates most dielectric materials such as plastic, ceramics, rubber, paper, cloth, and, in compare with X-Rays, has non-ionizing effect.

Previously, we have developed 140 GHz linear array scanner [1] for real time imaging postal applications (fig. 1). Sensor of the scanner consists of 160 sensitive elements.

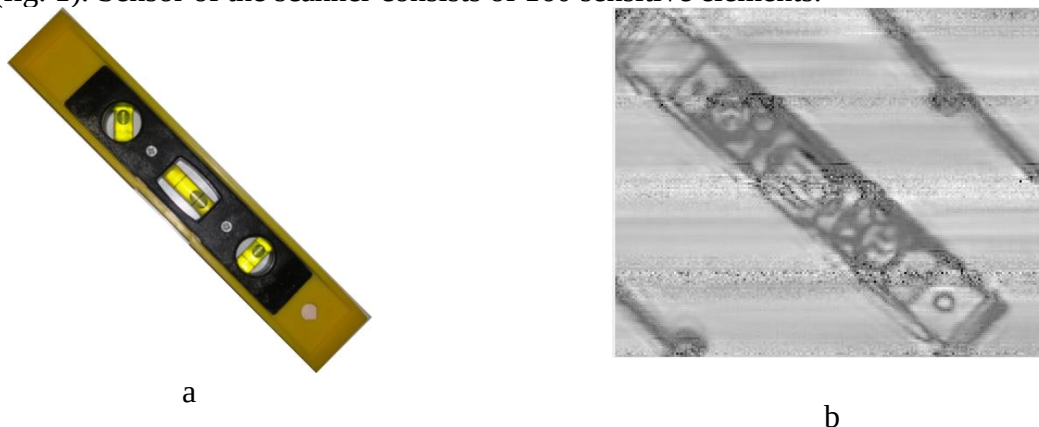


Fig. 1. Photo of a level (a), and 140 GHz image of the level covered by nontransparent plastic box received by linear array scanner (b).

Its basic is 8-element Si-MOSFET terahertz detector embedded to an integrated circuit with functions of amplifier, storage, double correlation sampling and switching of 8 detectors signals to the output. The detector was fabricated by 0.35 μm design rules of standard silicon CMOS technology, it has $\sim 8 \times 2.5 \text{ mm}^2$ dimensions, and distance between sensitive elements is 1 mm. The evaluated minimal possible noise equivalent power (NEP) at room temperature of Si-MOSFET terahertz detectors is $\sim 10^{-12} \text{ W/Hz}^{0.5}$ [2], but in the known experimental data the NEP value was not better than $\sim 2 \cdot 10^{-11} \text{ W/Hz}^{0.5}$ at 250 GHz [3].

Wavelength in the terahertz diapason is sufficiently larger than in the infrared or visible one, and therefore the linear and matrix array sensors for terahertz vision systems have bigger size. For example, for 140 GHz radiation frequency the corresponded wavelength is $\lambda \sim 2.14 \text{ mm}$. Because of diffractive limit, pixel size (meaning the sensing element together with the antennas) smaller than $\lambda/2 \sim 1 \text{ mm}$ does not lead to improvement of vision system spatial resolution. Finally, at 140 GHz radiation frequency the 100×100 image will require at least $100 \times 100 \text{ mm}^2$ matrix area.

To assemble 140 GHz large format matrix we have developed ‘small’ $6 \times 8 \text{ mm}^2$ printed circuit board (PCB). On this board basic 8-element detector and a standard 12-pin electrical socket were mounted on the top and on the bottom of PCB respectively (fig. 2 a, b). For large format of the sensor the ‘small’ PCBs are placed one after the other on ‘mother’ PCB (fig. 2 c).

This approach allows constructing of terahertz vision system with large number of elements and sensitive area. Resulting assembly has high maintainability.

Developed linear and matrix arrays terahertz detectors can be applied for automated detection of concealed items with assistance of a neural network-based system design [4]. There were demonstrated the effectiveness of employing a neural network YOLOv8 in postal terahertz scanners and its potential for use in security and surveillance applications [4].

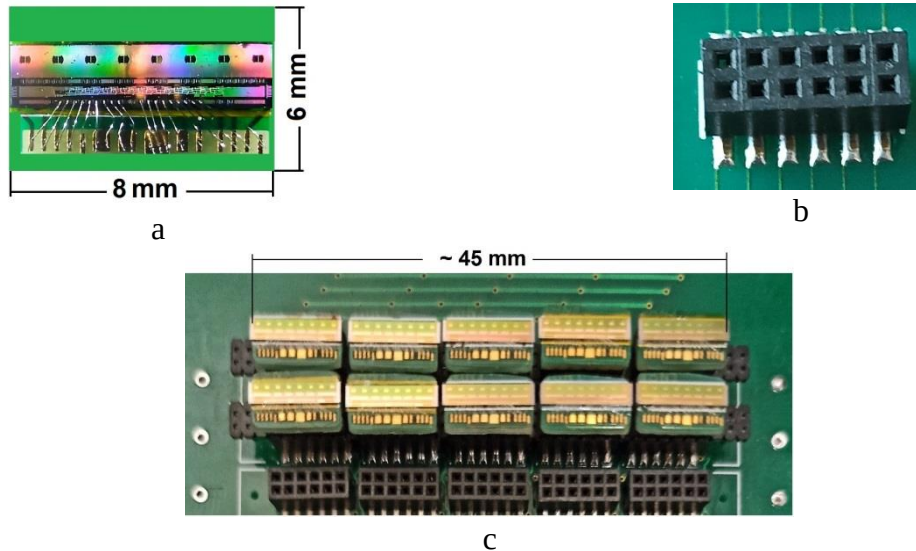


Fig. 2. Photos of top side of the 'small' PCB with 8-element Si-MOSFET detector (a) and connector (b) mounted on bottom side. Photo of fragment of the matrix array detector on PCB (two 40-element linear arrays placed on 'mother' PCB) – (c).

A convolutional neural network was trained on dataset contained 926 terahertz images of lighter, pill, packed pill, plastic card, knife, blade to classify and detect whether an image contains a prohibited item or not. The system is tested using realworld samples, achieving an accuracy of 95.5%.

Among different THz technology applications the visualization of concealed items is still costly and has not yet gained its potential due to complexity of utilization. The work partially solves the problem and simplifies developing large format THz detectors.

1. THz linear array scanner in application to the real-time imaging and convolutional neural network recognition /A.G. Golenkov, A.V. Shevchik-Shekera, M.Yu. Kovbasa, et al // SPQEO, V. 24, N 1, P. 90-99, (2021). doi.org/10.15407/spqeo24.01.090.

2. Performance limits of terahertz zero biased rectifying detectors for direct detection /A.G. Golenkov, F.F. Sizov //SPQEO, V. 19, N 2, P. 129-138, (2016), doi:10.15407/spqeo19.02.129.

3. Compact terahertz devices based on silicon in CMOS and BiCMOS technologies /D. But, A. Chernyadiev, K. Ikamas, C. Kołaciński, A. Krys, H. Roskos, W. Knap, A. Lisauskas //Opto-Electronics Review 31, (2023). doi.org/10.24425/opelre.2023.14.

4. Study of object detection in linear terahertz imaging systems /Kovbasa, M., Golenkov, A., Shevchik-Shekera, A., Sizov, F. //Optical Engineering, 62(8), 083104 (2023).

doi: <https://doi.org/10.1117/1.oe.62.8.083104>.

NAVIGATION THROUGH HIGH-DIMENSIONAL CHEMICAL SPACE: DISCOVERY OF $\text{Ba}_5\text{Y}_{13}[\text{SiO}_4]_8\text{O}_{8.5}$ AND $\text{Ba}_3\text{Y}_2[\text{Si}_2\text{O}_7]_2$

Nataliia Hulai, Marco Zanella, Craig M. Robertson, Daniel Ritchie, Matthew S. Dyer,
Luke M. Daniels, John B. Claridge, Matthew J. Rosseinsky

Department of Chemistry, University of Liverpool, 51 Oxford Street, Liverpool, L7 3NY, UK

Nataliia.Hulai@liverpool.ac.uk

Despite recent advances in automation and integrations of artificial intelligence in the exploration process, discovery of new materials still remains a challenging task. However, it has been already proven that the best outcome arises from augmentation of traditional experimental routines with the techniques and tools which enable more efficient exploration of chemical spaces, identification of new phases, and their characterization [1].

In a present study, we showcase how newly developed tools and techniques can be integrated in the traditional experimental route with an example of the solid-state chemistry. During an exploration of the $\text{BaO}-\text{Y}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{RuO}_2$ phase field, two new ruthenium-free phases were isolated using two complementary experimental routes. The schematic description of the exploration is shown in Figure 1. The first phase $\text{Ba}_5\text{Y}_{13}[\text{SiO}_4]_8\text{O}_{8.5}$ (A) was isolated using iterative diffraction-elemental analysis routine. The second phase $\text{Ba}_3\text{Y}_2[\text{Si}_2\text{O}_7]_2$ (B) is located in a SiO_2 -rich corner of the compositional diagram close to a competing glass field which prevented definitive use of elemental analysis. Due to challenging experimental synthetic conditions, isolation of this phase was guided by a computational tool Probabilistic Isolation of Crystalline Inorganic Phases (PICIP). The polycrystalline samples were analysed and the crystal structures were solved based on multiple source diffraction techniques. Combination of these complementary routines enabled discovery of phases in already well-explored chemical space. The unveiled structural peculiarities expand knowledge on the crystal chemistry of Ba-Y silicate compounds and open opportunities for further materials design.

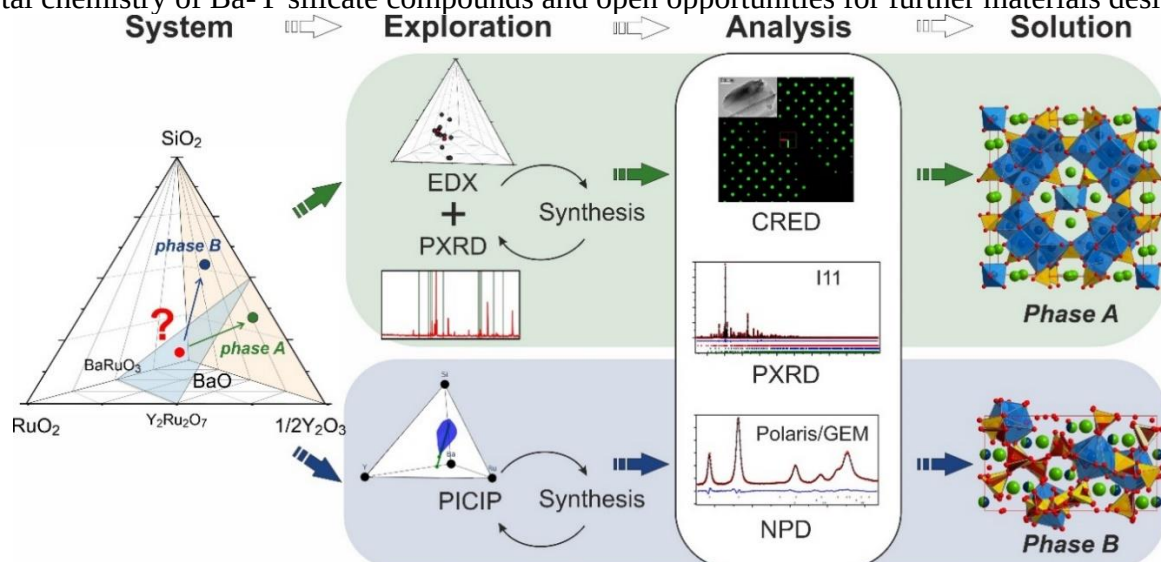


Figure 1. Schematic description of the exploration of the $\text{BaO}-\text{Y}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{RuO}_2$ chemical space. The first combines the established techniques of EDX with PXRD to identify compositions likely to contain higher fractions of the target phase. The second applies the computational tool PICIP to phase fractions of known phases in PXRD patterns to propose the next compositions to investigate on the basis of the lever rule and uncertainties in refined phase fractions.

1. Mroz A.M., Posligua V., Tarzia A., Wolpert E.H., Jelfs K.E., J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 18730.

УДК 621.865.8

ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ВИКОРИСТАННЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ У ВИКОНАВЧИХ ПРИСТРОЯХ ДЛЯ МІКРОПЕРЕМІЩЕНЬ

В.Ю. Денисюк, М.О. Огородник

*Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75,
v.denysiuk@lntu.edu.ua*

Галузь мікромеханіки, яка стрімко розвивається в різних областях техніки, включаючи мікроелектроніку, приладобудування, медичну техніку, дала потужний імпульс впровадженню п'єзоелектричних перетворювачів (ПП) в якості двигунів і пружних пристроїв на їх основі. З'являються все нові області використання ПП для маніпуляційних завдань робочих органів високоточних мініатюрних і мікромеханічних систем. Використання п'єзоелектричних виконавчих пристроїв в мікроманіпуляційних системах забезпечує плавну зміну швидкості в широкому діапазоні, формування траєкторії програмованого руху у мікропросторі, дозволяє отримувати аксіальне переміщення під будь-яким кутом, виконувати програмований «удар», наприклад, для проколювання мембрани клітини, а також, що особливо важливо, здійснювати позиціонування з високою точністю за відсутності дрейфу. Перехід на п'єзоелектричні виконавчі пристрої відкриває нові потенційні можливості для мікроманіпуляційних систем [1, 2]. А це в свою чергу пред'являє нові вимоги щодо точності мікропереміщень до основної кінематичної ланки таких систем – напрямної, яка трансформує параметри двигуна на робочий інструмент. Тому створення високоточних прецизійних мікроманіпуляційних систем з високоточними напрямними є життєво необхідним для реалізації мікротехнологій. Це обумовлює актуальність постановки задачі підвищення точності мікропереміщень п'єзоелектричних мікроманіпуляційних систем шляхом розроблення методики та побудови комп'ютеризованих засобів вимірювання лінійних та кутових переміщень їх складових елементів на основі використання сучасних засобів накопичення та обробки відеоінформації з подальшою її обробкою.

Аналіз існуючих розробок виробників показує, що перспективним в області створення виконавчих пристроїв для мікро- та нанопереміщень є напрямок, заснований на використанні п'єзоелектричного ефекту, який полягає в зміні лінійних розмірів окремих матеріалів в електричному полі. Цей п'єзоэффект зворотній. У датчиках механічних величин використовують прямий п'єзоэффект. У п'єзоактюаторах та п'єзодвигунах використовують зворотний п'єзоэффект, коли при застосуванні електричного поля змінюються лінійні розміри матеріалу. Виконавчі пристрої для мікро- та нанопереміщень, засновані на п'єзоелектричному ефекті більш перспективні, оскільки не чутливі до дії магнітних полів і мають більш широку сферу застосування [3, 4, 5].

П'єзоелектричні приводи набули широкого поширення в окремих областях науки і техніки завдяки сукупності притаманних їм корисних таких властивостей:

- вартість п'єзоелектричних приводів невисока в порівнянні з іншими;
- висока точність позиціонування (здатність здійснювати переміщення на рівні десятих і навіть сотих часток нанометрів);
- висока швидкість спрацьовування (в діапазоні мікросекунд);
- велике зусилля (не потрібні редуктори);
- простота конструкції і керування;
- низька споживана потужність;
- малий знос (на практиці знос не виявлено після кількох мільйонів робочих циклів) при відсутності механічних передач;
- відсутність магнітного поля (п'єзоелектричні приводи працюють від електростатичного поля, тому вони не генерують магнітного поля і не схильні до його впливу);

- можливість роботи в екстремальних умовах (п'єзоелектричні приводи здатні працювати в умовах знижених і підвищених температур, високого вакууму);
- компактні розміри і мала маса, що особливо підходить для області мікроелектроніки, біології тощо.

Володіючи таким спектром унікальних властивостей, п'єзоелектричні приводи знайшли застосування в медицині, оптиці, точній механіці, комп'ютерній техніці, виробництві напівпровідників, космічній техніці тощо. Розглядаючи можливості застосування п'єзоелектричних актюаторів в інших галузях науки та техніки, можна виділити такі напрямки:

- у мікроманіпуляційних системах – для складання мікровиробів, для біологічних досліджень та технологій і мікрохірургії, для приводу головок високоточних вимірювальних машин у прецизійних електроерозійних верстатах для двокоординатної подачі дроту;
- у якості вібраційних живильників мініатюрних деталей та орієнтуючих пристроїв;
- в автономних мікророботах, призначених для моніторингу навколишнього середовища (літаючі, повзаючі, плаваючі мініроботи), для лапороскопічної хірургії, ендоскопічної діагностики організму людини;
- в оптоелектронних перемикачах та сканерах технологічних лазерних установок, мініатюрних пристроях пневматики та гідравліки (мікронасоси та мікроклапани), призначених для роботи в медичних апаратах та приладах;
- у прецизійних багатокоординатних вібродвигунах, призначених для переміщення та орієнтації столиків мікроскопів та чутливих елементів навігаційних приладів;
- у пристроях побутового призначення – вібраційних бритвах та зубних щітках, вібромасажерах, іграшках.

Важливо відзначити, що п'єзокераміка може працювати з високою надійністю при високих температурах (до 300°C), в агресивних середовищах та у вакуумі, а також не створює значних електромагнітних полів у вібраційному режимі. Ці переваги формують перспективу використання п'єзоелектричних пристроїв у космічній техніці, в метрологічному обладнанні та електронній промисловості. БПА є найбільш дешевими п'єзоелектричними перетворюючими пристроями, мають великий діапазон переміщень вихідних ланок (до 1-2 мм) при силах порядку 1 Н. Сучасна вітчизняна промисловість освоює в даний час п'єзокерамічні вироби товщиною 0,1-0,2 мм, які дозволять знизити напругу живлення до 10-50 В, що спричинить подальшу мініатюризацію мехатронних пристроїв.

1. Діденко Ю. В., Татарчук Д. Д. Основи технології виготовлення елементів мікро- та наносистемної техніки: навч. посіб. Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. 113 с.

2. Хорольський В. П., Коренець Ю. М. Мехатроніка (мехатроніка та інтелектуальна автоматика): навч. посіб. Кривий Ріг: ДонНУЕТ, 2023. 342с.

3. Васильківський І. С., Фединець В. О., Юсик Я. П. Виконавчі пристрої систем автоматизації. Львів: Львівська політехніка, 2020. 220с.

5. Артюх О. М., Дударенко О. В., Кузьмін В. В. Основи мехатроніки: навч. посіб. Запоріжжя: НУ «Запорізька політехніка», 2021. 372 с.

5. Денисюк В. Ю., Огородник М. О. Мехатронний автоматизований комплекс для дослідження мікрооб'єктів. *«Прогресивні напрямки розвитку автоматизованих технологічних комплексів»*: зб. наук. праць VIII Міжнар. наук. техн. конф. ТК-2024 (м. Луцьк, 28-30 трав. 2024 р.). Луцьк: ЛНТУ, 2024. С. 23-24.

УДК 620.3

АНАЛІЗ ТЕХНОЛОГІЙ ЗАПИСУ ЗОБРАЖЕНЬ НА ТОНКИХ ПЛІВКАХ

В.Ю. Денисюк, О.Д. Кібиш

*Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75,
v.denysiuk@lntu.edu.ua*

За останні десятиліття було проведено велику кількість досліджень із запису зображень на тонких плівках. Були винайдені лазерні технології, які дозволяють створити мікроелектронні та фотонні елементи з мікронними розмірами, такі як фотолітографія з застосуванням резистів, термохімічний метод на металевих плівках з послідовним селективним травленням та інші. В даний час – століття буму інформаційних технологій – потрібне створення оптичних девайсів з надвисокою роздільною здатністю, причому мінімальний розмір елемента повинен бути менше 100 нм. Нелазерні літографічні технології зараз можуть забезпечити розмір елементів менше 10 нм, це технології, пов'язані із застосуванням пучків випромінювання високої енергії (електронних, іонних та рентгенівських) та літографія на основі скануючої зондової мікроскопії. Однак такі технології вимагають роботи в умовах високого вакууму, що визначає низьку швидкість меншої площі поверхні і високу вартість виготовлення. У сучасній індустрії обробки напівпровідникових чіпів (TSMC, Qualcomm, Intel тощо) застосовується літографія на основі глибокого ультрафіолету (DUV – Deep Ultraviolet) з використанням ексімерного лазера довжиною хвилі 193 нм, при цьому мінімальний розмір елемента був зменшений до 10 нм, а новітні системи літографії використовують наджорстке ультрафіолетове випромінювання (EUV – Extreme Ultraviolet) з довжиною хвилі 13,6 нм для подальшого зменшення розміру елемента до 3 нм. Хоча DUV/EUV літографічні технології мають переваги при масовому виробництві та високу ефективність, проте їх дороговартісна система літографії накладає обмеження на застосування в індивідуальному та дрібносерійному виробництві. З іншого боку, такі літографічні технології засновані на застосуванні шаблонів, тобто мікро/наноструктури спочатку виготовляються на шаблонах із використанням методів літографії без маски, таких як лазерний та електронно-променевиий запис, а потім переносяться на кремнієві пластини за допомогою проєкційної або наноімпринтної літографії. Тому необхідні дослідження з виготовлення масок простішими та ефективнішими лазерними методами для отримання необхідних нанорозмірних елементів, що задовольняють потреби індустрії з виробництва чіпів. Крім того, нанометровий масштаб амплітудної або фазової маски має важливе значення у формуванні дифракційних оптичних елементів (ДОЕ) або напівтонових фотошаблонів, які широко застосовуються у різних галузях індустрії, і особливо важливі в оптичному зв'язку, медицині та інших галузях [1].

Завдання підвищення просторового дозволу, продуктивності та точності обробки таких пристроїв стає особливо суттєвим. При цьому необхідно забезпечити виконання експериментальних досліджень у звичайних лабораторіях університетів або дослідницьких інститутів у світі. Відповідно до вищенаведених факторів прямий лазерний запис (DLW – Direct Laser Writing), заснований на прямому впливі лазерного випромінювання з матеріалом у дальній зоні пучка, є перспективним методом завдяки високій швидкості запису на великій площі та простоті операції. Технологія може змінюватися за типом формування оптичного зображення: скануючий лазерний запис сфокусованим пучком, лазерний інтерференційний запис, лазерний запис на основі цифрових мікродзеркальних пристроїв, лазерний запис з матричними зонними пластинами. Недоліком всіх методів оптичного запису є те, що розмір елемента залежить від довжини хвилі падаючого випромінювання. Для того щоб подолати дифракційну межу та записувати структури з розмірами елементів, меншими за 1 мкм, доцільно використовувати термохімічний метод запису на тонких металевих плівках з

формуванням областей з різною поглинальною здатністю. Такий метод є гарним інструментом для формування ДОО та напівтонових фотошаблонів. Поточні дослідження спрямовані на прямий лазерний запис на тонких металевих плівках з утворенням оптично прозорих оксидів, що не потребують операції травлення після випромінювання [2, 3]. Такий метод має безліч переваг перед термохімічним методом запису на тонких плівках хрому з наступним селективним травленням: у тому числі простота процедури обробки, зниження ризику помилок, а отже, підвищення точності та зменшення часу обробки. Принцип термохімічного методу залишається тим самим, заснованим на окисленні металевої плівки в області поблизу центральної зони гауссового розподілу інтенсивності випромінювання, що призводить до формування структур з високою роздільною здатністю. Однак складність вибору режиму та робочих параметрів та прогнозування результатів обробки, пов'язана зі специфічними оптико-термохімічними залежностями, що виникають при окисненні плівок, що утворюють прозорі оксиди, а також зміною при обробці плівки її оптичних та теплофізичних властивостей, ускладнюють застосування методу та вимагають значних теоретичних досліджень.

Дослідженням термохімічної локалізації записаних структур, що відбувається внаслідок сильної нелінійної залежності швидкості окислення від температури, визначено оптимальні діапазони параметрів для отримання надвисокої роздільної здатності. У порівнянні з температурним і оптичним зображенням термохімічне зображення істотно локалізується, оскільки сильне окислення відбувається тільки у вузькій зоні поблизу вершини гауссового розподілу інтенсивності випромінювання, де температура максимальна, розширення ширини термохімічного зображення обмежено опто-термохімічними зворотними зв'язками (при формуванні прозорих втрачає лазерної енергії через велике пропускання в центрі плями, і максимальна температура знижується доти, поки реакція окислення стає неможливою, при цьому зростання оксидного шару зупиняється).

Термохімічний лазерний запис ДОО на тонких плівках хрому з подальшим травленням було успішно реалізовано з використанням кругової лазерної записувальної системи (CLWS-300IAE). Дослідження показали, що можливо отримати максимальну роздільну здатність до 2 ліній/мкм на плівках хрому з подальшим травленням у разі використання системи CLWS-300IAE з довжиною хвилі безперервного лазерного випромінювання $\lambda = 532$ нм, сфокусованого на поверхні плівки в пляму з мінімальним діаметром $D = 600$ нм. Однак, під час переходу до запису на тонких плівках титану з утворенням оптично прозорих оксидів (без подальшого травлення) для отримання достатньої товщини оксиду необхідно впливати імпульсами тривалістю близько 1 мс, тоді як для утворення тонкого захисного шару оксиду Cr_2O_3 товщиною ~ 2 нм на плівках хрому достатньо тривалості впливу 1 мкс або менше. Збільшення тривалості впливу на 3 порядки може призвести до погіршення точності запису на плівках титану через теплопровідне розмивання зображення, а також ускладнює запис елементів субмікронних розмірів [3, 4]. Тому необхідно теоретично визначити області оптимальних параметрів впливу для формування субмікронних дифракційних структур на тонких плівках титану і визначити мінімальну ширину записаних елементів (для підвищення роздільної здатності) і можливість наскрізного окислення по всій товщині плівки (для підвищення контрасту термохімічного зображення).

1. Зайцев Р. В., Кіріченко М. В., Зайцева Л. В. Методи дослідження структури тонких плівок: підручник. Харків: ФОП Бровін О. В., 2021. 320 с.

2. Діденко Ю. В., Татарчук Д. Д. Основи технології виготовлення елементів мікро- та наносистемної техніки: навч. посіб. Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2022. 113 с.

3. Денисюк В.Ю., Симонюк В.П., Лапченко Ю.С., Шибковський І.А. Метрологічне забезпечення вимірювання механічних та трибологічних властивостей матеріалів на субмікронному і нанометровому діапазонах лінійних розмірів. *«Перспективні технології та прилади»*: зб. статей. 2020. Вип. 17. С. 33-41.

4. Сусліков Л. М., Дьордяй В. С. Фізика і технологія наноматеріалів: навч. посіб. Ужгород: Видавництво «Говерла», 2023. 437 с.

IMPROVEMENT OF MEASUREMENT OF IMMOBILIZATION OF PROTEINS BY THERMAL STABILIZATION OF THE SPR-BASED SENSOR SYSTEM

G.V. Dorozinsky, A.V. Samoylov, V.V. Romanchuk, R.V. Khrystosenko, L.Yu. Khomenkova

*V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 41
Prospekt Nauky, Kyiv 03028, Ukraine.*

E-mail: vladyslav.v.romanchuk@gmail.com

Surface plasmon resonance (SPR) based sensors are highly sensitive to low concentrations of investigated substances [1], enabling their wide usage as precise analytical devices for laboratory research in biology, medicine, agriculture, and the environment control. Most of such sensors based on the Kretschmann configuration [2] which consists of a laser, a photo detector and a prism, the working surface of which is covered with nanometer gold film in which plasmons are excited. The photo detector obtains changes in the intensity of the reflected from gold film laser light after passing through a prism in angular modulation, obtaining an SPR curve (Fig.1). The angle position of minimal intensity, also called the SPR angle, is sensitive to changes in the refractive index (RI) of the investigated medium caused by chemical or biological processes on the gold film surface, allowing real-time and label-free investigation of it.

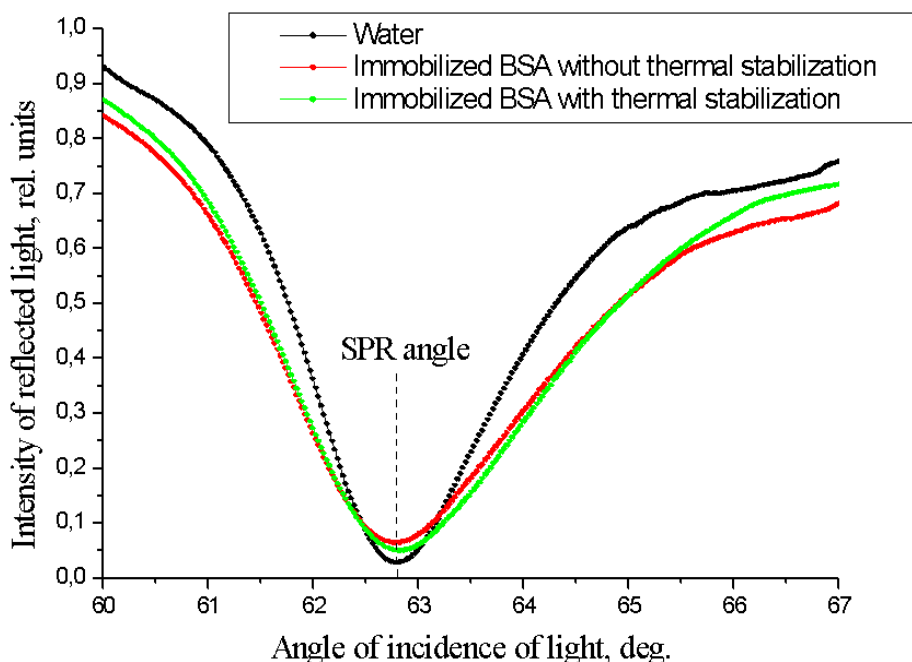


Fig. 1. Angular dependence of intensity of reflected light for deionized water and immobilized BSA molecules on gold surface of sensitive element of SPR-sensor.

However, the SPR phenomenon is sensitive to deviations of pressure and temperature of the investigated medium [3]. The temperature drift effect can be minimized using thermal compensation or thermal stabilization methods [4]. Moreover, temperature drift is most evident in biological studies that require long-term measurements, particularly immobilization of antigen-antibody, distorting the results of measurements. Therefore, it was important to determine the effect of temperature changes on protein immobilization process on gold surface of SPR-sensor.

To understand effect of changing temperature in SPR-measurements in case of protein immobilization we used SPR-based system including SPR-refractometer PLASMON-6 and peristaltic pump developed by the Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine [5], and also thermosetting box, in which device was placed with vessels including investigated liquids. The SPR angle shift (Fig.2) was recorded during the pumping through PLASMON-6 flow cell severally

one by one deionized water and bovine serum albumin (BSA) solution (300 nM) with constant speed 30 $\mu\text{L}/\text{min}$.

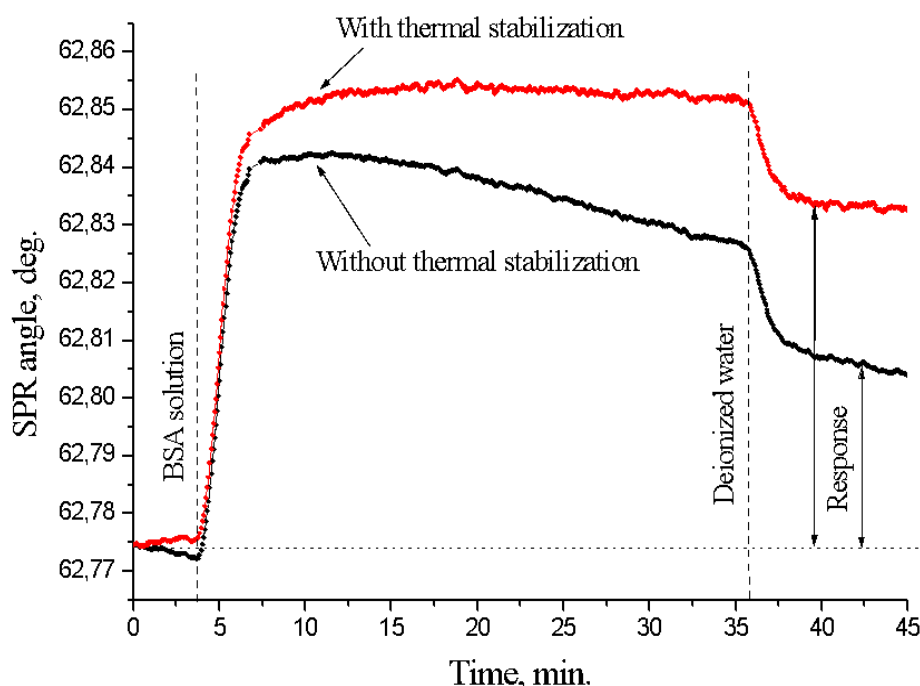


Fig. 2. Shift of SPR angles caused by immobilization of BSA on the surface of the sensitive element

Measurements were repeated both without and with thermal stabilization, providing a stable temperature of 20°C inside the thermosetting box and flow cell. The measurements results of sensor responses after BSA immobilization showed, that in the case of thermal stabilization SPR-sensor response was 84% greater (0.059°), than the response in absence of stabilization (0.032°).

So, it was proven that thermal stabilization of the measuring equipment of the SPR-based system reduces the temperature error and provides a greater response, increasing the reliability of the investigation of the kinetics of chemical and biological processes.

This work was supported by the National Research Foundation of Ukraine from the state budget, project 2023.04/0119 «Automated integrated sensory system based on the phenomenon of surface plasmon resonance for express control of signs of particularly dangerous oncopathologies» and by the National Academy of Sciences of Ukraine.

1. J. Homola, S. S. Yee, and G. Gauglitz, Surface plasmon resonance sensors: Review, *Sens. Actuators B*, Vol. 54, 1999, pp. 3–15.
2. E. Kretschmann and H. Raether, Radiative decay of nonradiative surface plasmons excited by light, *Z. Phys.*, Vol. 239, 1968, P. 2135.
3. S.K. Özdemir, G. Turhan-Sayan, Temperature effects on surface plasmon resonance: design considerations for an optical temperature sensor, *J. Light Wave Technol*, Vol. 21(3), 2003, pp.805–815.
4. Yu.V. Ushenin, G.V. Dorozinsky, V.P. Maslov, T.A. Turu, N.V. Kachur. Application of temperature sensors for improving the device based on the phenomenon of surface plasmon resonance, *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*, Vol. 13 (1), 2016, pp. 33-38.
5. G.V. Dorozinsky, N.V. Kachur, H.V. Dorozinska, A.V. Fedorenko, I.V. Yatsenko and V.P. Maslov, Highly-sensitive to n-hexane vapors SPR sensor with an additional ZnO layer, *Optical and Quantum Electronics*, Vol. 56, 2024, P.1213.

УДК: 539.121, 537.533.8, 621.384, 537.533.8, 539.121

ОСОБЛИВОСТІ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНИХ ПУЧКІВ ПРИСКОРЕНИХ ЕЛЕКТРОНІВ З АМОРФНИМИ ТА МОНОКРИСТАЛІЧНИМИ СТРУКТУРАМИ

С. Карпусь^{1,2}, Г. Коваленко², Ю. Казарінов², І. Шляхов², І. Семісалов², Т. Малихіна³

¹ Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75

² Інститут фізики високих енергій та ядерної фізики Національного наукового центру
«Харківський фізико-технічний інститут» м. Харків, вул. Академічна, 1

³ Aalto University, T313 Dept. Computer Science, Finland

E-mail: s.karpus@lntu.edu.ua

Використання пучків прискорених електронів в галузі фундаментальних та прикладних досліджень дозволяють вирішувати цілу низку важливих питань з дослідження процесів електрон-електронної взаємодії в речовині та удосконалювати технологію електронного опромінення матеріалів. Добре відомо, що при проходженні високоенергетичного пучка крізь речовину експериментально спостерігається ряд ефектів, що дають змогу оцінити не лише іонізаційні втрати первинного пучка, а ряд процесів, що пов'язані з електрон-електронною взаємодією. До них відносяться вихід вторинних електронів (вторинна емісія електронів), які розподіляють на низько-енергетичні та високо енергетичні (дельта електрони), розвиток електронної лавини в речовині під електронним опроміненням (поляризація середовища), розподіл вторинних електронів за енергіями та їх концентрація в речовині (ефект густини та динаміку радіохімічних процесів), ефекти каналювання у монокристалічних структурах, тощо. Знання залежності виходу вторинних електронів та їх енергетичний розподіл важливі для розуміння процесів в електронних приладах, вакуумній електроніці, техніці прискорювачів заряджених частинок, електронній мікроскопії, у вимірювальних приладах: електронні детектори та мас-спектрометрія, у космічній технології: динаміка накопичення заряду та розряди в електронних приладах космічних апаратів, ефективне управління плазмовими процесами іонних двигунів, у твердотільній електроніці та дослідженні матеріалів, телекомунікації та радіотехніці для підвищення генерації та підсилення сигналів, тощо.

В роботі представлено опис експериментального устаткування [1], особливості методики [2] дослідження та основні результати [3-5], що отримані при взаємодії пучків прискорених електронів з аморфними мішенями на електронних прискорювачах ННЦ ХФТІ. Використання розробленого експериментального устаткування з системами керування та вимірювання параметрів пучка[6], впровадження методики дослідження взаємодії високоенергетичних електронів з тонкими плівками на простірл дозволило дослідити залежності виходу вторинних електронів в залежності від товщини плівок, їх матеріалу та відповідно енергії первинного пучка електронів. Встановлено залежності виходу дельта електронів від товщини тонких плівок та їх Z , отримано універсальні залежності їх виходу як функції від електронної густини, дано оцінку перерізу утворення дельта-електронів. Обговорюються перспективи подальших досліджень з метою отримання нових даних з виходу вторинної емісії та взаємодії високоенергетичних електронів з аморфними та монокристалічними структурами.

1. G.D. Kovalenko, V.Y. Kasilov, Yu.H. Kazarinov, S.H. Karpus, I.L. Semisalov, S.S. Kochetov, O.O. Shopen, I.M. Shliakhov. Universal Experimental Facility Of IHEPNP NSC KIPT For Research Of High-Energy Electron Beam Interaction With Thin Amorphous And Single-Crystal Structures. Problems of Atomic Science and Technology. Series "Nuclear Physics Investigations". 2022. № 3(139), p. 23-28. <https://doi.org/10.46813/2022-139-023>

2. S. Karpus, I. Shliakhov, M. Liashchov, V. Borisenko, S. Kochetov, E. Tsiats'ko, O. Shopen. Application features of the electrostatic systems for measuring the secondary electron emission yield // Problems of Atomic Science and Technology. 2023. № 4. P. 184-189. <https://doi.org/10.46813/2023-146-184>
3. Grygoriy Kovalenko, Stepan Karpus, Igor Semisalov, Oleh Shopen, Tetyana Malykhina, Ilya Shliakhov. Delta Electron Emission Yield of Relativistic Electron Passing Through Thin Aluminum Foils. Journal of the Physical Society of Japan. 92. 034706. 2023. 10.7566/JPSJ.92.034706 <https://doi.org/10.7566/JPSJ.92.034706>
4. S.H. Karpus, G.D. Kovalenko, Y.H. Kazarinov, V.M. Dubina, V.Y. Kasilov, S.S. Kochetov, I.N. Shliakhov. Secondary electron emission from thin Aluminum foils produced by high energy electron beams. Problems of Atomic Science and Technology. Series "Nuclear Physics Investigations" (6). 2021. 136. p. 38-41. <https://doi.org/10.46813/2021-136-038>
5. Grygoriy Kovalenko, Stepan Karpus, Valentyn Kasilov, Igor Semisalov, Oleh Shopen, Serhiy Kochetov, Tetyana Malykhina, Ilya Shlyakhov. Secondary Electron Emission of Relativistic Electron Passing Through Thin Foils. Journal of the Physical Society of Japan. 91. 114706. 2022. <https://doi.org/10.7566/JPSJ.91.114706>
6. I.N. Shlyahov, N.I. Maslov, S.H. Karpus, G.D. Kovalenko, I.L. Semisalov, A.A. Kapliy, S.K. Kiprich, V.D. Ovchinnik, M.Yu. Shulika, G.P. Vasiliev, V.I. Yalovenko. Development of a measuring channel for low currents integrating on Analog Devices components and Arduino modules for physical experiments // Problems of Atomic Science and Technology. 2022. №5. P. 42-45. <https://doi.org/10.46813/2022-141-042>

УДК 621.3

ФОРМУВАННЯ ЛАВИННОГО ФОТОДІОДУ НА ОСНОВІ КРЕМНІЮ

**О. Кульбачинський, В. Мельник, С. Сапон, О. Оберемок, О. Дубіковський, О. Косуля,
З. Максименко, В. Коротєєв, О. Сидор**

*Відділ іонно-променевої інженерії, Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України. Проспект Науки, 41, Київ-03028, Україна.
ober@isp.kiev.ua*

Кремнієвий лавинний фотодіод (ЛФД) є ключовим елементом виявлення слабких оптичних сигналів ближнього ІЧ діапазону для швидкодіючих систем реєстрації та лазерного визначення відстані до сканованого об'єкту (LIDAR). Найбільш важливими характеристиками ЛФД є чутливість, швидкість відгуку та коефіцієнт підсилення сигналу [1]. Реалізувати ці переваги ЛФД часто буває складно через чутливість лавинного фотоструму до генераційно – рекомбінаційних процесів в області лавинного помноження при класичному виконанні діоду методом іонної імплантації. Одним із методів зменшення впливу рекомбінаційних процесів є оптимізація розподілів активних домішок в області лавинного помноження [2]. Проведені моделювання розподілів електричних полів в структурі ЛФД дозволили визначити оптимальні значення енергій та доз імплантації легуючих домішок.

На рисунку 1(а) показано поперечний переріз виготовленого кремнієвого ЛФД на технологічній платформі CMOS. Видно, що розроблена конструкція складається з класичної композиції електроактивних n⁺-p-p⁺-π-p областей. Шар n⁺ було сформовано високодозовою імплантацією іонів миш'яку (E = 60 кеВ, D = 6.25×10¹⁵ см⁻²) у імплантований бором (E = 800 кеВ, D = 3.1×10¹² см⁻²) пластину Si (111) (питомий опір 6000 Ом•см) з подальшим відпалом при температурі 1000°C впродовж 120 секунд в середовищі азоту. Після цього на кремнієвій пластині формувалася термічний оксидний шар товщиною 60 нм.

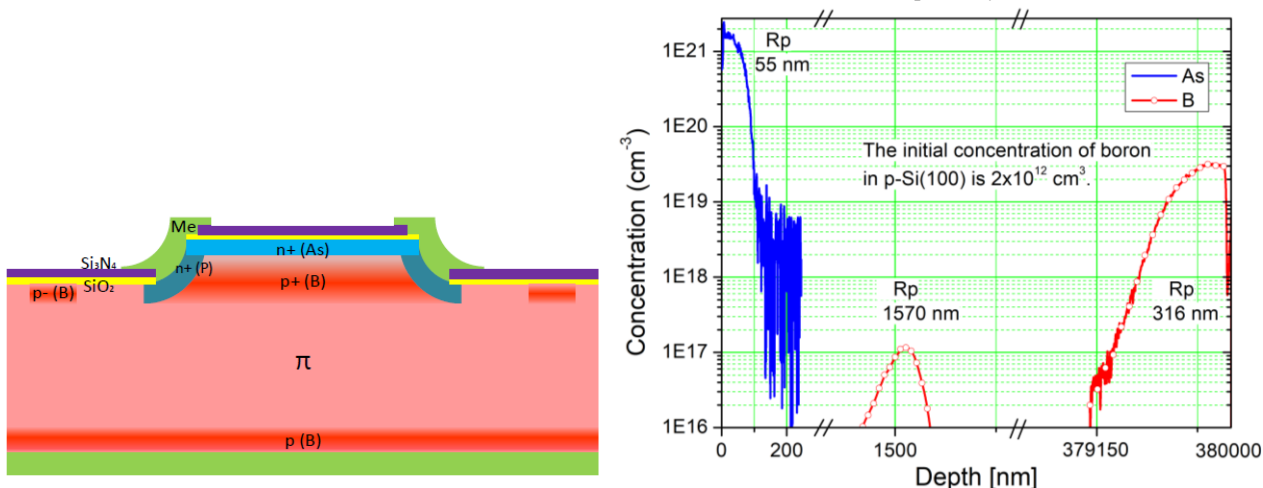


Рис.1 Схематичне зображення поперечного перерізу виготовленого лавинного фотодіода (а) та ВІМС профілі розподілу легуючих домішок по глибині (б).

Мезаструктуру формували ізотропним хімічним травленням на глибину 1.8 мкм. Охоронне кільце навколо зони реєстрації було створено імплантацією іонів бору з енергією 50 кеВ і дозою $6.25 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Омичний контакт до тильної сторони кремнієвої пластини був утворений імплантацією іонів бору з енергією 100 кеВ і дозою $6.25 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Формування контактів до шару n+ (As) здійснювалось методом термодифузії навколо мезаструктури для забезпечення рівномірного розподілу електричного поля. Загонку атомів фосфору в структуру проводили при температурі 1000 °С протягом 30 хвилин в атмосфері N₂. Формування металевих контактів до області n+(P) досягалося послідовним осадженням плівок титану та золота товщиною 4 та 250 нм відповідно. Формування просвітлюючого покриття виконувалося нанесенням плівок SiO₂ та Si_xN_yH методом ICP PECVD.

На рисунку 1(б) показано ВІМС профілі розподілу легуючих домішок арсену та бору по глибині оптимізованої структури лавинного фотодіода. ВІМС вимірювання здійснювались пучком первинних іонів O₂⁺ з енергією 5 кеВ. Для глибокого ВІМС профілювання здійснювалось попереднє розпилення низько енергетичними іонами аргону з високочастотної плазми низького тиску. Видно, що максимуми розподілу миш'яку та бору поблизу лицьової сторони ЛФД знаходяться на глибині 55 та 1570 нм, відповідно.

На малюнку 2(а) показані ВАХ, отримані в темновому та фотострумівому режимах. Вимірювання темнового струму проводилися за допомогою аналізатора напівпровідникових приладів Keysight B2910BL усередині заземленої металевій скриньки. Вимірювання фотоструму проводилися з ЛФД освітленням світлодіодом з довжиною хвилі 1050 нм. Видно, що напруга пробію становить близько 150 В. На рисунку 2(б) представлена спектральна характеристика кремнієвого лавинного фотодіода при напрузі 100 В. Видно, що максимальний фотовідгук спостерігається на довжині хвилі 1020 нм.

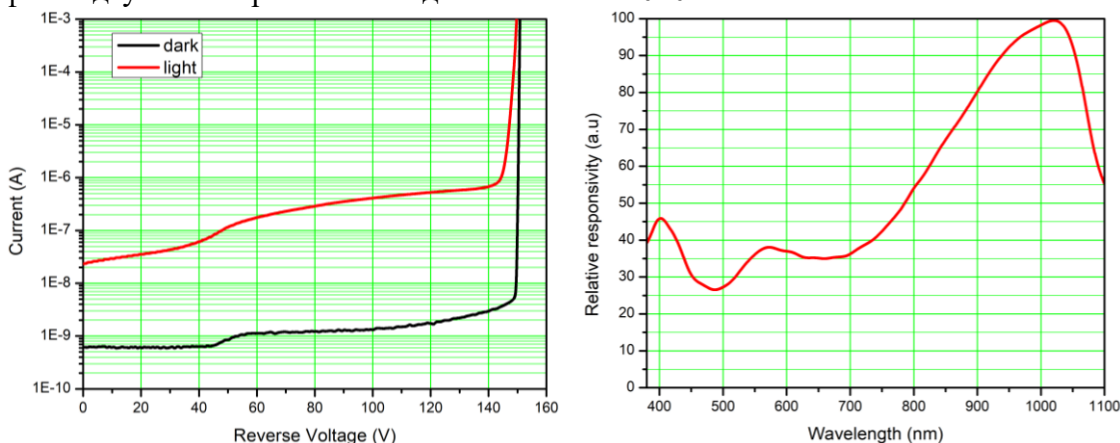


Рис. 2. Вольт – амперна (а) та спектральна (б) характеристика ЛФД

Вимірювання вольт-амперних та спектральних характеристик ЛФД показали, що виготовлений на основі CMOS технології пристрій демонструє прийнятний рівень темнового струму, рівня шумів, низьку напругу пробоя та високий коефіцієнт посилення струму. Отримана чутливість ЛФД знаходиться в межах 20 А/Вт. Сильний фотовідгук в інфрачервоній області свідчить про перспективність використання пристрою для реєстрації слабого ІЧ випромінювання. Подальша оптимізація дозволить використати ці прилади в системах виявлення LIDAR.

1. Liu D, Li T, Tang B, Zhang P, Wang W, Liu M, Li Z., A Near-Infrared CMOS Silicon Avalanche Photodetector with Ultra-Low Temperature Coefficient of Breakdown Voltage // Micromachines. – 2022. – 13. – 47(p.8).
2. Shin D., Park B., Chae Y., Yun I. The effect of a deep virtual guard ring on the device characteristics of silicon single photon avalanche diodes. IEEE Transactions on Electron Devices, – 2019, 66(7), p.p. 2986-2991.

УДК 620.179:620.19

ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ ЕЛЕКТРОКОНТАКТНОГО ЗВАРЮВАННЯ ЛИСТІВ НИЗЬКОВУГЛЕЦЕВОЇ СТАЛІ

В.С. Рибальченко, Ю.П. Фещук, В.П. Кашицький

*Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75,
y.feshchuk@lntu.edu.ua*

Електроконтактне зварювання передбачає отримання нероз'ємного з'єднання металевих конструкцій шляхом сплавлення кромки металу в локальній ділянці. В багатьох випадках виникає поява дефекту у вигляді кратерів або заглибин за рахунок втискування електродів, що складно усунути через підвищення пластичності в зоні зварювання. В іншому випадку зниження зусилля стискування або генерація меншої кількості теплоти призводять до зменшення площі контакту та утворення зварного з'єднання низької міцності. При цьому важливим фактором виступає контактний опір [1, 2], який визначає утворення кількості тепла в процесі проходження електричного струму. Загальний або динамічний електричний опір складається з об'ємного опору та контактного опору, який складається з двох частин: опору контактних містків та опору півки. Опір півки знижується дуже швидко, оскільки підвищення температури зменшує як питомий опір, так і твердість. Таким чином, вплив опору півки на поверхні електрода є незначним. Встановлено, що поверхня електрода чутлива до плавлення, якщо опір контактних містків на поверхні електрода є високим. Поверхня заготовки зазнає плавлення, що пов'язано з виділенням тепла, яке пов'язане з густиною концентрованого електричного струму на краю електрода. Опір контактних містків, який зазвичай враховує опір термічного контакту, є поширеною проблемою, оскільки недосконалий контакт між двома твердими поверхнями створює нерівномірний розподіл теплового потоку, що проявляється у вигляді падіння середньої температури на межі розділу.

Основною проблемою формування міцного зварного з'єднання є забезпечення надійного мікроскопічного електричного контакту між виступами на поверхні листової заготовки, що здійснюється за рахунок пластичної деформації в зоні зварювання. Однак при цьому необхідно враховувати появу дефектів, що потребує пошуку оптимальних технічних рішень. Застосування ступеневого прикладання зусилля стискування дозволяє забезпечити надійний контакт між листовими конструкціями та уникнути появи слідів деформації. Встановлено, що проведення трьохступінчастого режиму зварювання, який передбачає застосування мінімального зусилля стискування та сили струму на першому етапі дозволяє локально нагріти до 100-140 °С поверхню заготовки та наблизити виступи на поверхні листових

конструкцій. На другому етапі відбувається підвищення зусилля стискування на 20-25 %, що дозволяє знизити опір контактних містків між електродом та заготовкою і забезпечити виділення необхідної кількості теплової енергії. На третьому етапі застосовують максимальне зусилля стискування, в результаті чого відбувається формування міцного зварного з'єднання без видимих слідів пластичної деформації.

Застосування оптимального режиму циклічного навантаження дозволяє підвищити міцність зварного з'єднання на 15-18 % та уникнути появи локальних слідів від стискування електродів.

1. Hamed M., Atashparva M. (2017). A review of electrical contact resistance modeling in resistance spot welding. *Welding in the World*. 61(2). DOI: [10.1007/s40194-016-0419-4](https://doi.org/10.1007/s40194-016-0419-4)

2. Wei P., Tzong-Huei Wu T., Chen L. (2013). Joint Quality Affected by Electrode Contact Condition During Resistance Spot Welding. *IEEE Transactions on Components, Packaging, and Manufacturing Technology*, 3(12):2164-2173. DOI: [10.1109/TCPMT.2013.2284497](https://doi.org/10.1109/TCPMT.2013.2284497)

УДК 542.8:543.2

ТЕРМІЧНИЙ АНАЛІЗ ЯК СПОСІБ ДОСЛІДЖЕННЯ СКЛАДУ ЙОННОГО АСОЦІАТУ

Т.І. Савчук, С.І. Корольчук, Д.С. Гудим, Н.М. Цалковський

Волинський національний університет імені Лесі Українки, Україна, Луцьк

savchuk.tanja@vnu.edu.ua

Електрохімічні сенсори широко застосовуються на практиці для прямого потенціометричного визначення, потенціометричного титрування, біохімічних і клінічних досліджень, для досліджень в області океанографії й агрохімії і т.д. Із великої кількості можливих речовин ми зупинились на йонних асоціатах (ІА) трийодид-іонів з основними барвниками в якості електродоактивної речовини (ЕАР). Тому часто виникає необхідність визначати стійкість та структуру одержаного ІА [1-4].

Комплексний термогравіметричний (ТГ), диференційний термогравіметричний (ДТГ) та диференційний термічний (ДТА) аналіз дає змогу дослідити стійкість синтезованих йонних асоціатів, процеси, які відбуваються під час їх деструкції, визначити склад продуктів розкладу. Результати термічного аналізу сполук можуть бути одним із методів підтвердження їх індивідуальності. Дослідити склад і структуру одержаного ІА можна за допомогою диференційно-термічного аналізу, який дозволить виявити термічну стійкість і характер розкладу комплексів. Дослідження проводили на дериватографі Паулік-Паулік-Ердей. Термограми записували на діаграмну стрічку, чутливість каналів ТГ – 50 або 100 мг, ДТГ – 100 МКВ, ДТА – 100 мкВ. Газоподібні продукти термолізу ідентифікували якісними реакціями.

Проводили термічний розклад йонного асоціату з барвником бутилродаміном (БР) та трийодидом. Розклад проводили ІА BR^+I_3^- в атмосфері повітря. Як видно з дериватограм (рис. 1.) та з (табл. 1) ІА BR^+I_3^- починає помітно розкладатися при температурі вищій ніж 140 °С.

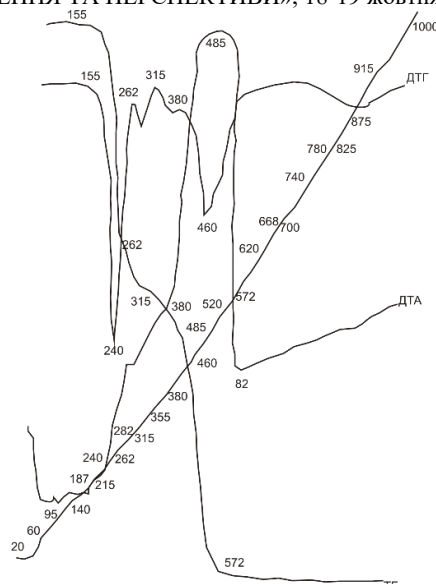


Рис. 1. Дериватограма іонного асоціату $BR^+I_3^-$

При цьому спостерігається велика втрата маси і ендотермічний ефект при 240 °С. Далі спостерігаються два невеликі екзотермічні ефекти з максимумом при 282 °С і 355 °С. Втрата маси на цьому етапі складає 52,5 %, що може відповідати виділенню $2NH_3$, $4C_2H_4$, C_4H_8 , $2HI$, які були ідентифіковані якісними реакціями. На останньому етапі в межах 380 – 720 °С відбувається згоряння ІА, яке супроводжується екзотермічним ефектом при температурі 485 °С із значною втратою маси.

Таблиця 1. Термічний розклад синтезованого іонного асоціату

Сполука	Тем-ний інтервал, °С	T_{max} , °С	Втрата маси, %		Продукти виділення
			Екс.	Розр.	Твердий залишок
$C_{32}H_{39}O_3N_2^+ \cdot I_3^-$ $BR^+I_3^-$	140 – 262	240, енд	42,50		$2NH_3 + 4C_2H_4$ $C_4H_8 + 2HI$ ($20C + 7H + 3O + I$)
	262 – 315	282, екз	5,50	52,50	
	315 – 380	355, екз	5,00		
	380 – 720	485, екз	46,50	47,95	
Сумарна втрата маси			99,50	100,00	

Отже, термічний аналіз підтвердив структуру синтезованого іонного асоціату.

1. Кормош Ж.О. Наукові основи створення нових аналітичних систем для визначення форм деяких неорганічних та органічних речовин за допомогою сенсорів та молекулярних спектральних методів/ Ж. О. Кормош, Я. Р. Базель, Т. І. Савчук та інші // Річна сесія наукової ради НАН України з проблем “Аналітична хімія”, Гурзуф (Кримська АР) 16-20 травня 2011 р.– Гурзуф, 2011.– С. 37

2. Н. Ступницька, Т. Савчук, С. Корольчук, Ж. Кормош. Сенсор для визначення окисників і відновників // Матеріали III Всеукраїнської науково-практичної конференції “Актуальні проблеми хімії та хімічної технології”, 21 – 22 листопада 2018 р. – К.: НУХТ, 2018 р. – с. 28-29.

3. Potentiometric Sensor for Analgin Determination in Pharmaceutical formulations/ Z.A.Kormosh, T.I.Savchuk, D.I.Semenishin, S.V. Suprunovich, V.V.Kochubei, S.I.Korolchuk // Methods and objects of chemical analysis. – 2020,- V.15, № 2. – P. 66-72.

4. Пат. u202100766, G01N 27/30, C25B 11/04. Спосіб виготовлення графітно-пастового іонселективного електрода для визначення активності пентахлорфенолят-іоні / Савчук Т., Кормош Ж.; Кормош Н. ; Юрченко О.М.; Корольчук С.; Горбатюк Н., Бохан Ю.– №148339; – заявл. 19.02.2021. опубл. 28.07.2021, Бюл.№30.

УДК 543.42

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ДОСЛІДЖЕННЯ ПОВЕДІНКИ У ПОВІТРІ ШТУЧНО ВВЕДЕНИХ НЕГАТИВНИХ ІОНІВ ХЛОРИДУ НАТРІЮ

В.Ю. Пуць , С.А. Федосов , Л.В. Яшинський, Д.А. Захарчук, Ю.В. Коваль

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, l.yashchynskyu@lntu.edu.ua*

Вплив техногенного середовища на людину має велику кількість аспектів, серед яких – додаткова до природної іонізація повітря. Технологічна іонізація відбувається при впливі на повітряне середовище радіоактивного, рентгенівського, ультрафіолетового випромінювання, та інших іонізуючих факторів, обумовлених технологічними процесами [1]. Утворені при цьому іони “живуть” в основному у безпосередній близькості від технологічної установки. Для вивчення поведінки таких іонів у повітрі, а отже і впливу їх на людину нами вивчалась штучна іонізація, яка здійснюється спеціальними пристроями - іонізаторами. Іонізатори забезпечують в обмеженому об'ємі повітряного середовища задану концентрацію іонів певної полярності [2, 3]. Поряд з цим існують пристрої, які генерують аероіони певних хімічних сполук відповідного знаку.

Опрацьовано методику та розроблено установку для дослідження поведінки аероіонів хлориду натрію у електричному полі при атмосферному тиску. Для визначення концентрації негативних аероіонів нами використана установка, електрична схема якої зображена на рисунку 1.

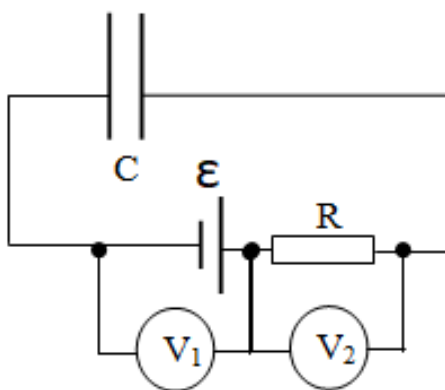


Рис. 1. Електрична схема установки для визначення концентрації негативних аероіонів хлориду натрію у повітрі за величиною спаду напруги на зовнішньому опорі.

В даній установці зовнішнім повітряним електричним конденсатором С слугували дві сіткові площини з провідного матеріалу. Позитивно заряджена площина із зовнішньої сторони закрита діелектриком для відрізання звідти потоку негативних аероіонів [4, 5]. Повітряний конденсатор знаходився у ізольованій камері на відстані 1м від джерела аероіонів. Наявні в

повітрі іони прискорені електричним полем повітряного конденсатора замикають електричне коло створюючи в цьому колі струм, який пропорційний концентрації іонів.

Залежність концентрації негативних аероіонів хлориду натрію в ізольованій камері від часу роботи генератора аероіонів представлено на рис. 2.

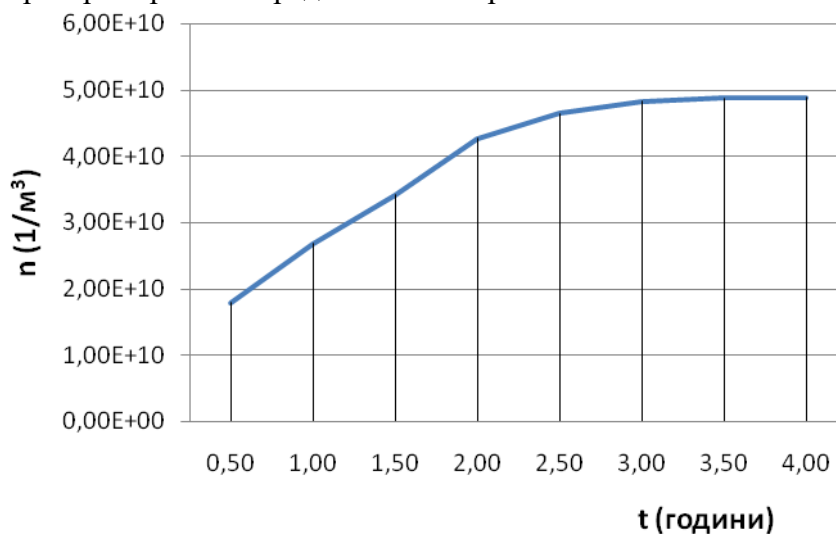


Рис 2. Залежність концентрації негативних аероіонів хлориду натрію від часу роботи генератора аероіонів.

Вихід залежності на насичення практично після трьох годин роботи генератора пояснюється:

- зростанням ймовірності рекомбінації негативних аероіонів великої концентрації з природними позитивними іонами повітря;
- зростанням ймовірності прилипання (осідання) негативних аероіонів хлориду натрію на стінках камери із зростанням їх концентрації [6, 7].

Необхідно зауважити, що при продовженні роботи генератора понад 6 годин (дані не приведені на графіку) відбувається подальше зростання концентрації негативних аероіонів через вичерпання в камері природних позитивних іонів повітря.

1. Міністерство охорони здоров'я України. Наказ від 08.04.2014 № 248. Зареєстровано в Міністерстві юстиції України 6 травня 2014 р. за № 472/25249: Про затвердження Державних санітарних норм та правил «Гігієнічна класифікація праці за показниками шкідливості та небезпечності факторів виробничого середовища, важкості та напруженості трудового процесу».

2. Коренівська О.Л. Вимірювання концентрації від'ємнозаряджених аероіонів. / О.Л. Коренівська, В.Ф. Манойлов, П.П. Мартинчук // Збірник тез доповідей 8 Міжнародної науково-технічної конференції Приладобудування: стан і перспективи, 28-29 квітня 2009 р. Київ ПБФ, НТУУ «КПІ», 2009. С. 169 -170.

3. Knoll M., Eichmeier J., Schon R. Properties, Measurement and Bioklimatik Aktion of "Small" Multimolekular Atmospherik Ions .- "Advances in Electronics and Electron Physic", 1964. Vol. 19, p.177-254.

4. Л.Г. Асламазов. Рух заряджених частинок в електричному і магнітному полях . «Квант», 1984, № 4.

5. Eichmeier J. Beitrag zum Problem der Struktur der atmospharischen Kleinionen.- "Zeitschrift fur Geophysik", 1968, Vol.34, S.297-322.

6. Eichmeier J., Braun W. Beweglichkeitsspektrometrie atmospherischer Ionen.- "Meteorologische Rundschau", 1972, Vol.25, №1, S.14-19.

7. Сена Л. А. Рухливість іонів і електронів. Електронний ресурс: CNews.html, 2016.

УДК 621. 315. 592

СТАБІЛЬНІСТЬ І НАДІЙНІСТЬ ТВЕРДОТІЛЬНИХ НАКОПИЧУВАЧІВ

П.В. Сахнюк, А.М. Кубінський, Д.А. Шава, О.В. Замуруєва

*Волинський національний університет імені Лесі Українки м. Луцьк, вул. Банкова, 9
Sakhniuk.Pavlo@vnu.edu.ua*

Твердотільні накопичувачі (SSD) стали стандартом для зберігання даних у сучасних комп'ютерах, завдяки своїй швидкості та надійності. Основною технологією, на якій ґрунтується робота SSD, є NAND флеш-пам'ять, яка забезпечує зберігання даних без використання рухомих механічних частин. Це дозволяє знизити ризик механічних пошкоджень, що є серйозною перевагою в порівнянні з традиційними жорсткими дисками (HDD). Однак, попри численні переваги, SSD стикаються з проблемами стабільності та надійності, які необхідно розглядати для забезпечення їх довговічності.

Один із ключових факторів, що впливають на надійність SSD – це обмежена кількість циклів запису та стирання. Це означає, що при інтенсивному використанні накопичувача, зокрема в середовищах, де часто відбуваються записування великих обсягів даних, є ризик швидкої деградації пам'яті.

Деградація пам'яті є ще однією важливою проблемою. Вона виникає через накопичення електричних зарядів у комітках пам'яті, що може призводити до зниження їхньої ефективності з часом. Це явище стає особливо актуальним при частому записуванні та видаленні даних. Виробники SSD використовують технології управління зносом (wear leveling), які допомагають розподілити записи по всій площі пам'яті, щоб уникнути перенавантаження окремих комірок. Це дозволяє значно підвищити довговічність накопичувача, проте не усуває проблему деградації зовсім.

Температура та енергоспоживання також мають великий вплив на стабільність SSD. При високих температурах електронні компоненти можуть працювати нестабільно, що веде до зниження продуктивності та надійності. Це особливо важливо для серверних рішень, де постійне навантаження може призвести до перегріву. Деякі моделі SSD оснащені системами охолодження, але це не завжди є достатнім для запобігання проблемам, пов'язаним із температурою. Енергетична стабільність накопичувачів також важлива, оскільки раптові відключення живлення можуть призвести до втрати даних або пошкодження файлової системи.

Втрата даних через відмову SSD — це ще одна серйозна проблема, з якою стикаються користувачі. Хоча SSD не мають рухомих частин, вони не застраховані від електричних збоїв, механічних пошкоджень або програмних помилок. Для мінімізації ризиків, пов'язаних із втратою даних, виробники впроваджують технології резервного копіювання та відновлення даних.

Отже, хоча твердотільні накопичувачі пропонують багато переваг, їх стабільність і надійність залишаються важливими питаннями. Виробники постійно вдосконалюють технології, щоб вирішити існуючі проблеми, проте користувачам важливо усвідомлювати ризики і вживати заходів для збереження даних. Обираючи SSD, варто звертати увагу не лише на продуктивність, а й на довговічність та надійність, що в підсумку забезпечить більш ефективне та безпечне зберігання інформації.

1. Pires F. Solidigm Introduces Industry-First PLC NAND for Higher Storage Densities. Tom's Hardware. URL: <https://www.tomshardware.com/news/solidigm-plc-nand-ssd> (дата доступу: 23.09.2024).

2. C. Zambelli, L. Crippa, R. Micheloni, P. Olivo Points-over threshold statistics for post-retention read disturb reliability in 3D NAND flash, in Proc. IEEE Int. Integr. Rel. Workshop (IIRW), South Lake 540 Tahoe, CA, USA, 2020, c. 1–5.

ФРАКТАЛЬНІСТЬ НЕСПІВМІРНОЇ НАДСТРУКТУРИ В КРИСТАЛАХ [N(CH₃)₄]₂CuCl₄.

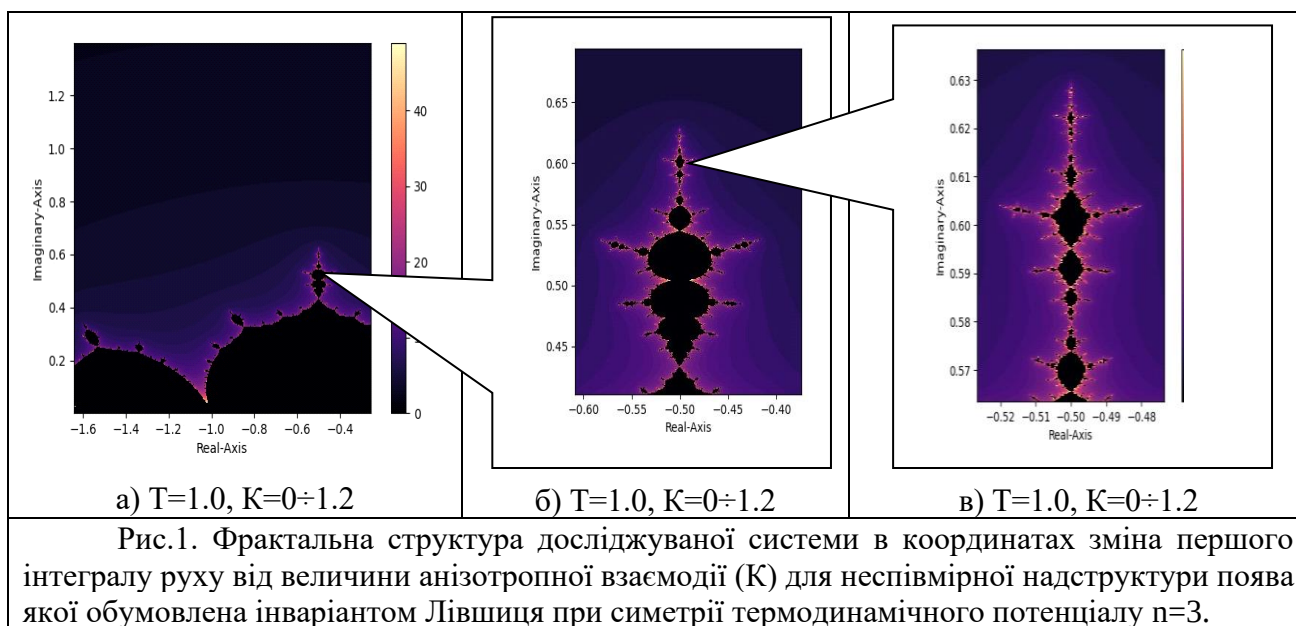
С. Свелеба, І. Катеринчук, І. Куньо, Н. Гвоздьов, Ю. Капчук

*Львівський національний університет імені Івана Франка
вул. ген. Тарнавського, 107, 79017 Львів, Україна*

Фрактальна структура в хаотичних системах важлива для розуміння та прогнозування їхньої динаміки. Вона може допомогти в поясненні складних структур та взаємодій у хаотичних системах, а також в розробці ефективних методів моделювання та управління такими системами.

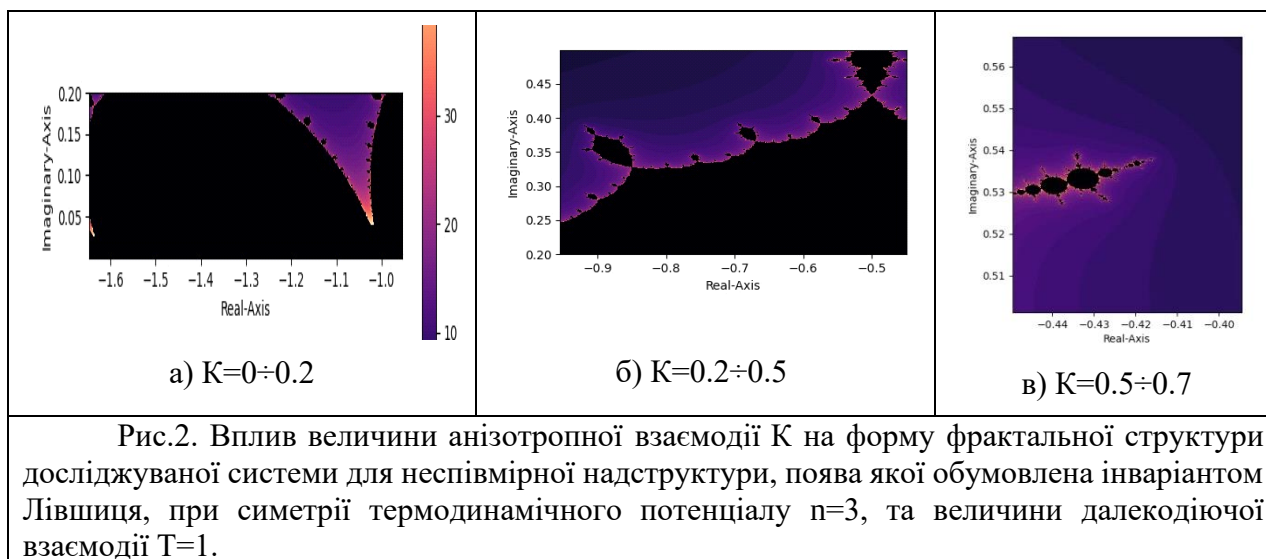
Особливу увагу заслуговують неспівмірні надструктури, які виникають в кристалічних структурах в неспівмірних фазах. Дані неспівмірні фази характеризуються існуванням ряду режимів даної надструктури. А саме синусоїдальним, солітонним, та стохастичним. Тому викликає інтерес характер фрактальної структури в даних режимах. Відомо, що в неспівмірних фазах внаслідок збільшення анізотропної взаємодії проходить збільшення кількості гармонік існуючих коливань, які і спричиняють перехід неспівмірної (НС) надструктури від синусоїдального режиму до солітонного, а в подальшому і до стохастичного режиму.

На Рис.1 наведено вигляд фрактальної структура для неспівмірних надструктур, поява яких обумовлена інваріантом Лівшиця, за умови що симетрії термодинамічного потенціалу $n=3$ ([N(CH₃)₄]₂CuCl₄). Оскільки динаміка неспівмірної надструктури описується процесом подвоєння кількості існуючих гармонік, то відображення фрактальності будемо здійснювати з допомогою логістичної функції, яка описує процес подвоєння кількості гармонік виду : $z_{n+1} = -z_n^2 - z_n$. Згідно Рис.1 форму фрактальності можна



віднести до виду «сильно подібних». Оскільки при пониженні температури від фазового переходу вихідна - неспівмірна фаза, до фазового переходу неспівмірна – співмірна фаза проходить процес збільшення величини анізотропної взаємодія, то процес побудови фракталу здійснювався в комплексній площині, де в якості дійсної частини виступала величина анізотропної взаємодії (K), а в якості величини уявної частини значення першого інтегралу руху. Фрактальна поведінка фазової функції неспівмірної надструктури засвідчує її складну поведінку, а саме методом подвоєння кількості існуючих гармонік НС проходить перехід між режимами неспівмірної надструктури. Ще однією особливістю неспівмірної надструктури яка

описується термодинамічним потенціалом з симетрією $n=3$, є існування двох неспівмірних надструктур. Тобто HC фаза одна, але структура її різна (I_1 та I_2) в різних областях фазової діаграми. На Рис.2 наведено результати дослідження фрактальної надструктури в різних інтервалах змін величини анізотропної взаємодії. Дані інтервали вибирались у відповідності із аномальними змінами ляпуновського коефіцієнта який відповідає за зміну фази параметра порядку. Згідно Рис.2 при незначних змінах анізотропної взаємодії ($K=0 \div 0.2$) простежується існування першої неспівмірної фази I_1 . При $K=0.2 \div 0.5$ простежується існування фази I_2 , яка характеризується більш розвинутим спектром наявних гармонік, які при подальшому зміні K ($K=0.5 \div 0.7$) спричиняють перехід до солітонного режиму. Виходячи із форми фрактальної структури, солітонний режим неспівмірної надструктури характеризується вищими гармоніками хвилі неспівмірності (Рис.2,в).



Отже в процесі збільшення величини анізотропної взаємодії простежується існування двох неспівмірних фаз з однаковою структурою, при чому остання характеризується існуванням солітонного та стохастичного режиму. Солітонний режим характеризується існуванням вищих гармонік, а перехід від одного режиму до іншого пов'язаний із збільшення кількості існуючих гармонік (Рис.2, б,в). В наслідок цього проходить перехід до стохастичного режиму неспівмірної фази з виникненням хаотичного стану, про це свідчить зростання величини фрактальної розмірності.

**МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ
АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ АРТЕМІЗИНИН НА КАТОДІ,
МОДИФІКОВАНОМУ ВАНАДІЙ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ**

**В.В. Ткач^{1,9}, М.В. Кушнір¹, Т.В. Морозова², М.Ж. Монтейру³, І.О'Ніл де
Маскареньяш Гайвау⁴, Я.Г. Іванушко⁴, А.О. да Сілва⁵, П.І. Ягодинець¹, Ж.О. Кормош⁶,
О.В. Луганська⁷, Ж.Р. Гарсія⁸, Ж.І. Феррау да Пайва Мартінш⁹**

¹Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича, Україна

²Національний транспортний університет, Україна

³Університет Траз-уж-Монтіш і Алту-Доуру, Португалія

⁴Буковинський державний медичний університет, Україна

⁵Федеральний університет Заходу штату Пара, Бразилія

⁶Волинський національний університет ім. Лесі Українки, Україна

⁷Запорізький національний університет, Україна

⁸Штатний університет м. Понта-Гросса, Бразилія

⁹Факультет інженерії університету Порту, Португалія

Артемізинин (Рис. 1) – напівсинтетичний препарат, що був відкритий у процесі пошуку препаратів проти малярії у 1972 році китайським фармацевтом Ту Ю, що у 2015 році отримав половину Нобелівської премії з фізіології та медицини.

Артемізинин ефективний проти паразитичних круглих та плоских червів, а також до одноклітинних і личинок паразитичних комах. З іншого боку, його активність залежна від дози. Мало того, наявність органічної пероксидної групи призводить до того, що він може виділяти реакційні окисні частинки, через що його визначення стає дійсно актуальним завданням.

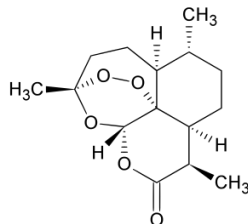
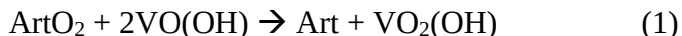
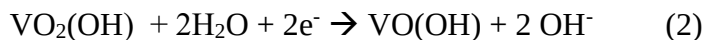


Рис. 1. Артемізинин

У даній роботі описується з теоретичної точки зору електрохімічне визначення артемізинину на катоді, модифікованому Ванадій(III) оксигідроксидом. В даному випадку реакція відновлення проходить в першу чергу за *ендо*-пероксидною групою з утворенням Ванадій(V)оксигідроксиду:



У нейтральному та слабколужному середовищі відновлення відбудеться також і гідроліз естерної групи, через що відновних піків буде два. Ванадій (III) оксигідроксид регенерується за катодною реакцією (2):



Аналіз системи диференціальних рівнянь (3), що описує поведінку даної системи:

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} = \frac{2}{\delta} \left(\frac{A}{\delta} (a_0 - a) - r_{r1} - r_h \right) \\ \frac{da^*}{dt} = \frac{2}{\delta} (r_h - r_{r2}) \\ \frac{dv}{dt} = \frac{1}{V} (r_{l1} + r_{l2} - r_r) \end{cases} \quad (3)$$

Підтверджує ефективність катодного електрохімічного процесу для електрохімічного визначення артемізинину. В залежності від концентрації лікарського засобу система переходить у дифузійний або кінетичний режим. В будь-якому випадку стаціонарний стан встановлюється легко.

УДК 621.763

АНАЛІЗ ПОВЕРХНІ КОМПЛЕКСНОГО ЛАЗЕРНОГО ПОКРИТТЯ ПІСЛЯ ТЕПЛОВОГО ВПЛИВУ

О.П. Уманський¹, Н.П. Зайчук², С.П. Шимчук²

¹ Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича, м. Київ

² Луцький національний технічний університет, м. Луцьк

o.umanskyi@ipms.kyiv.ua, n.zaichuk@lntu.edu.ua, s.shimchuk@lntu.edu.ua

Певні деталі авіаційних двигунів, дослідницьких установок та автомобільних компонентів потребують реставрації та частой заміни через втрату ваги, спричинену окисленням та вигорянням основної маси металу. Враховуючи дефіцит і вартість жароміцних і жаростійких сплавів, а також різницю в якості металу між різними світовими виробниками, використання жаростійких покриттів може частково вирішити цю проблему.

Добре відомо, що деталі авіаційних двигунів виготовляються з різних конструкційних матеріалів (наприклад, сталей, титанових сплавів) і працюють у складних умовах експлуатації, в тому числі при високих температурах. Залежно від частин авіаційного двигуна (ступенів), робочі температури можуть сягати від 600 до 1200 °C. Тому навіть сучасні жароміцні сталі та сплави не можуть повною мірою вирішувати поставлені перед ними завдання. До таких завдань відноситься, в першу чергу, забезпечення жароміцності, жаростійкості, заданих геометричних розмірів і зносостійкості протягом усього періоду експлуатації між капітальними ремонтами і безпроблемного демонтажу при плановому технічному обслуговуванні. Зокрема, це стосується різних типів кріпильних елементів (болтів, шпильок) різного діаметру та довжини.

Варто зазначити, що всі авіаційні деталі та деталі з жароміцних і жаростійких матеріалів і сплавів, зокрема, мають складний технологічний процес виготовлення через свої фізико-механічні властивості (ці матеріали є складними сплавами з високим вмістом різних легуючих елементів). Це стосується як фінішних операцій механічної обробки різанням [1, 2], так і термічної обробки [3, 4].

Метою нашої роботи було дослідження цирконієвих покриттів для підвищення жаростійкості авіаційних матеріалів, що дозволить розширити їх робочий діапазон до температур понад 1000 °C. Для досягнення цієї мети планувалося дослідити покриття на основі ZrO₂, легованого Ni та CaO в різних пропорціях. Отримані покриття мали бути випробувані на жаростійкість при температурах 1000 °C, 1100 °C та 1200 °C, а також досліджені процеси окислення та структурні зміни. Задля цього було виготовлено ряд зразків з покриттями на основі ZrO₂ та здійснено певні дослідження, в тому числі аналіз поверхні зразків. Аналіз поверхні включав макроструктурні дослідження та визначення якісного складу.

Аналіз поверхні зразків та його вигляд дали можливість оцінити зміни під дією високих температур у повітряному середовищі. На поверхні зразків після тесту на жаростійкість виявлено деякі окиди та неметалеві включення: SiO₂ та його похідні, як крихкі так і ущільнені; поліацетиленові включення (C₂H₂); ультрамарин Na₆Al₆Si₆O₂₄S₄; CuSO₄, Al(NO₃)₃, Tetraethyl Orthosilicate Si(OC₂H₅)₄ та ряд слідів інших полімерних сполук. Окремі з них могли утворитись при взаємодії компонентів вихідного порошку, а частина під дією високих температур нанесення покриття та атмосфери, в якій це покриття формувалось.

Окрім того збільшення ваги окремих зразків дало поштовх до припущення, що за температур вище 900 °C відбувається дифузія іонів Ca²⁺, як наслідок це дає найбільший приріст окалини на зразках з домішками CaO у покритті. За температур, при яких здійснювали дослідження жаростійкості можливе утворення CaZrO₃ з CaO та ZrO₂, що сприяє збільшенню

об'єму. Як стверджують дослідники, лінійне розширення може досягати навіть 11 % за температур близьких до 1500 °C [5].

Окалина, що утворюється на цирконієвому покритті не є захисною. Сам цирконій має здатність поглинати велику кількість кисню. Оксид цирконію ZrO_2 зазвичай росте вгору від поверхні зразка, а під його окисною плівкою може утворюватись металічний шар з високим вмістом кисню, що вже зустрічалося у результатах досліджень деяких авторів. У наших дослідженнях покриття з вмістом Ni до 30 % показує найменший приріст. Найбільший приріст товщини покриття з Ca до 10 %. Такі результати підкреслюють дію нікелю, як стабілізатора жароміцності покриття в цілому та сприяють склуванню. Загалом, взаємодіючи з нікелем, цирконій може утворювати ряд інтерметалічних сполук, які мають високу твердість, різну стійкість у високотемпературному середовищі (найнижча – 920°C для Ni_3Zr ; найвища – 1440°C для Ni_7Zr_2), але окремі включення нажалі мають високий показник крихкості [6, 7].

Товщина шару окалини різних покриттів різна. Такий результат можливий через те, що дифузія кисню при високих температурах накладається на дифузію іонів металевих включень, того ж самого цирконію, нікелю.

Здійснивши аналіз даних по зміні ваги зразків було відмічено, що зразки з усіма типами покриття найбільше змінилися в масі за нагріву до 1200 °C. Найменший приріст по вазі мають усі зразки з температури 1000 °C. Загалом, при тепловій витримці за температур 1000 та 1100 °C можна відмітити, що зразки з покриттям, що містить кальцій мають найвищий приріст по вазі, а найменший – зразки з вмістом Ni 10%.

З опрацьованих поверхонь можна впевнено сказати, що найбільш «дефектним» є покриття, яке містить у своєму складі Ca, на це вказує порушення цілісності поверхні – пористі кратери, рвані краї в деяких ділянках зразків, потемніння на поверхні покриття. Зразки, які містили Ni у складі покриття після нагріву до 1100 та 1200 °C мають різко виражені межі між покриттям, підкладкою та основним матеріалом, чого не можна сказати про зразки оброблені за температури 1000 °C. Також на поверхні покриття після нагріву до цих же температур спостерігаються поодинокі застигли краплі невідомого походження, що доцільно аналізувати далі.

Недоліком у проведених дослідях можна вважати те, що підготовані після нанесення покриття зразки піддавались різанню, а незначні нерівності поверхні сприяють руйнуванню утворюваних захисних плівок окислів на основному металі і на покритті, що сприяє більшому окисленню та проникненню окислів всередину металу. Однак метою досліджень стояло дослідження продуктів окислення і поведінки покриття при нагріванні.

1. Chalyj, V., Moroz, S., Tkachuk, A., Zablotskyi, V., Trokhymchuk, I., & Stelmakh, O. (2023). Formation of bearings parts waviness in centerless mortise grinding on rigid -A21. [https://doi.org/10.21272/jes.2023.10\(1\).a3](https://doi.org/10.21272/jes.2023.10(1).a3)

2. Trokhymchuk, I., Svirzhevskiy, K., Tkachuk, A., Zabolotnyi, O., Zablotskyi, V.: The Structure of Automated Control Systems for Precision Machining of Parts Bearing. In: , et al. Innovations in Mechatronics Engineering II. 2022. Lecture Notes in Mechanical Engineering. Springer, Cham. pp 182–192 (2022). https://doi.org/10.1007/978-3-031-09385-2_1

3. Xu, N., Wang, L., Hu, J., Liu, H., Yu, S., Xu, W. (2022). Batch annealing enhances the yield strength of a high quenching temperature Q&P steel through accelerated bainitic transformation. Materials Science and Engineering: A, 855, art. no. 143888. <https://doi:10.1016/j.msea.2022.143888>

4. Ko, K.-H., Kang, H.-G., Huh, Y.-H., Park, C.-J., Cho, L.-R. (2022). Effects of heat treatment on the microstructure, residual stress, and mechanical properties of Co–Cr alloy fabricated by selective laser melting. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials. A, 126, art. no. 105051. <https://doi:10.1016/j.jmbbm.2021.105051>

5. Jacek Szczerba, Zbigniew Pędzich, The effect of natural dolomite admixtures on calcium zirconate-periclase materials microstructure evolution, Ceramics International, Volume 36, Issue 2, 2010, Pages 535–547, ISSN 0272-8842, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2009.09.025>.

6. LI, L. H., et al. Thermodynamic properties and solidification kinetics of intermetallic Ni 7 Zr 2 alloy investigated by electrostatic levitation technique and theoretical calculations. Journal of Applied Physics, 2016, 119.3: 035902. <https://doi.org/10.1063/1.4940243>

7.LÜ, P., et al. Thermophysical properties of undercooled liquid Ni-Zr alloys: Melting temperature, density, excess volume and thermal expansion. Computational Materials Science, 2017, 135: 22-28. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.04.003>

УДК 539.2:621.315.548.0 : 612.029.62, 621.315.592

ЛАЗЕРНО-СТИМУЛЬОВАНА МОДИФІКАЦІЯ НАПІВПРОВІДНИКІВ

Ц. Цао², С.М. Левицький^{1*}, О.В. Стронський¹

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, Україна

²Національний технічний університет України Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського", Київ, Україна

*levytskyi@ua.fm

Метод лазерно-стимульованої обробки напівпровідників, зокрема монокристалів CdTe дозволяє формувати на поверхні зразка структури різноманітної морфології із заданими фотоелектричними властивостями для створення функціональних елементів опто- і мікроелектроніки – сонячних елементів, детекторів рентгенівського і гамма – випромінювання, фотоприймачів, інфрачервоних фільтрів і т. д. У зв'язку з широкими перспективами застосування імпульсних лазерних технологій для створення приладних структур оптоелектронної техніки на основі складних напівпровідникових матеріалів важливою є задача точного визначення порогових режимів їх лазерностимульованого плавлення та плазмоутворення.

При лазерностимульованій модифікації поверхні напівпровідників є актуальним точне визначення порогу плавлення для оптимального контролю і керування фотоелектричними властивостями. При дії лазерного випромінювання на поглинаюче конденсоване середовище відбувається цілий ряд різних процесів. Після часткового відбивання на границі розділу падаюче випромінювання проникає в речовину і поглинається в приповерхневому шарі, товщина якого відповідає оберненій величині коефіцієнту поглинання α . Поглинута енергія термалізується, що супроводжується зміною фізичних і хімічних властивостей опроміненої речовини. Слід підкреслити, що розмір зони впливу лазерної дії не обмежується величиною $1/\alpha$ чи глибиною прогріву, оскільки імпульс тиску, що виникає в зоні опромінення, поширюється на значно більші відстані.

У нашому випадку при опромінюванні кристалів A^2B^6 , зокрема $p\text{-CdTe}$, імпульсами випромінювання лазера наносекундної тривалості з густиною потужності нижче за поріг руйнування відбувається зміна електричних, фотоелектричних і оптичних властивостей не тільки в приповерхневій області матеріалу, але і на глибині $\sim 5\text{мкм}$, що набагато перевищує глибину поглинання світла ($\alpha \sim 10^5\text{ см}^{-1}$). Причиною цих змін є утворення власних дефектів решітки за рахунок її розігрівання, виникнення термопружних напруг, дії акустичної і ударної хвилі (УВ) при опромінюванні кристалу.

Одним з ефективних методів управління властивостями напівпровідників є метод лазерної обробки, використання якого дозволяє в залежності від співвідношення величини кванта лазерного випромінювання $\hbar\omega$ та ширини забороненої зони E_g трансформувати його при поверхневій ($\hbar\omega > E_g$) чи об'ємній ($\hbar\omega < E_g$) властивості.

При виконання даної роботи встановлено, що при опроміненні кристалів CdTe та GaAs наносекундними імпульсами лазера залежність амплітуди акустичного сигналу від інтенсивності лазерного імпульсу є нелінійною, що пояснюється наявністю акустичної емісії при плавленні та кристалізації приповерхневого шару кристалів та реактивним тиском парів речовини, що випаровується з розплаву. Встановлено, що поріг плавлення монокристалічного CdTe при опроміненні імпульсами рубінового лазера наносекундної тривалості відповідає інтенсивності опромінення 8 МВт/см^2 , а відповідно поріг плавлення GaAs – 6 МВт/см^2 .

УДК 539.2:621.315.548.0 : 612.029.62, 621.315.592

АКУСТИЧНИЙ ВІДГУК В НАПІВПРОВІДНИКАХ ПРИ ЛАЗЕРНОМУ ОПРОМІНЕННІ

Ц. Цао², С.М. Левицький^{1*}, О.В. Стронський¹

¹Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, Україна

²Національний технічний університет України Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського", Київ, Україна

*levytskyi@ua.fm

Дія досить інтенсивних імпульсів оптичного випромінювання на поверхню поглинаючих конденсуючих середовищ супроводжується нагрівом і зміною агрегатного стану опромінюваної речовини. Швидка зміна щільності $\Delta\rho$ створює в опромінюваній речовині імпульси тиск, параметри якого залежать від процесів, що відбуваються в зоні опромінювання і прогрівання. Дія імпульсного лазерного випромінювання на конденсовані середовища приводить до виникнення фотоакустичного (ФА) відгуку, який містить в собі інформацію про процеси поглинання і перетворення енергії в зоні лазерної дії і служить могутнім засобом дослідження нерівноважних фазових перетворень. Різноманітність механізмів фотогенерації звуку призводить до того, що ФА-відгук формується як протягом часу збудження, так і при релаксації енергії лазерної дії. Для типових напівпровідників, що опромінюються імпульсами наносекундної тривалості, найбільш ефективними є термопружний і електрон-деформаційний механізми. Тимчасова затримка ФА-відгуку по відношенню до лазерного імпульсу обумовлена в основному часом перетворення поглиненої енергії в звукову і часом розповсюдження звуку від зони лазерної дії до акустичного приймача. Особливості прояву ФА-відгук в процесі лазерного відпалу монокристалів кремнію. Під впливом опромінювання монокристалів Si лазерними імпульсами, окрім ФА-відгуку виникає додатковий акустичний імпульс, затриманий по відношенню до фотоакустичного на часовий інтервал, що значно перевищує не тільки час розповсюдження звуку від області генерації до приймача, але і час загасання звуку в досліджуваному зразку. Виникнення такого випромінювання є незвичайним, оскільки не може бути пояснено ніяким з відомих механізмів формування ФА-відгук в напівпровідниках. Як об'єкт дослідження служив монокристалічний кремній зрізів (111) і (100) товщиною від 400 до 700 μm . Лазерний відпал здійснювався випромінюванням імпульсного лазера на алюмо-ітрієвому гранаті, що працював в режимі вільної генерації з тривалістю імпульсу 4 нс на довжині хвилі випромінювання 1.06 μm . Реєстрація акустичних імпульсів, виникаючих в зразку як у процесі дії лазера, так і після неї, проводилася з допомогою п'єзоелектричного перетворювача, акустичний контакт якого із зразком створювався за допомогою акустичної зв'язки на основі епоксидної смоли. Перетворювач був зроблений з п'єзокераміки ЦТС-19 і розміщений в неопромінюваній області зразка на відстані 30 мм від зони збудження. У випадку, коли густина потоку лазерного випромінювання перевищувала величину $E_1 > 81 \text{ Дж/см}^2$, на поверхні кристалу в області зони лазерної дії був знайдений розплав. При густині потоку лазерної дії $E > 90 \text{ Дж/см}^2$ крім ФА-відгуку виникає ще один акустичний імпульс, котрий затриманий по відношенню до фотоакустичного і перевищує його за амплітудою. Слід відмітити, що крім тріщиноутворення акустична емісія може виникати і внаслідок кристалізації розплавленого шару. Проте, як видно з даної роботи час існування розплаву складає 1-2 мсек, тоді як акустична емісія спостерігається з тимчасовою затримкою в десятки мілісекунд і більше. Тому природу виявленої тут в процесі лазерного відпалу монокристалів кремнію акустичної емісії найімовірніше пов'язувати з крихким руйнуванням матеріалу в зоні лазерної дії під впливом поля термопружних напруг.

Реєстрація акустичних збурень в конденсованому середовищі може слугувати ефективним методом дослідження фазових переходів при дії на поверхню середовища

концентрованих потоків енергії. Подібний підхід відповідає узагальненню відомого акустичного методу на область нелінійних ефектів, коли стан середовища може суттєво змінюватися під дією лазерного опромінення. В роботі імпульси фотоакустичного тиску в опромінюваній речовині реєструвались плівковим п'єзодатчиком товщиною 1 мкм і площею поверхні порядку 1 мм². Робоча частота датчика становила приблизно 50 МГц, що дозволяло фіксувати зміни фото акустичного тиску з характерним часом в декілька наносекунд. Імпульси випромінювання від неодимового лазера з довжиною хвилі 1,06 мкм і тривалістю 20 нс. фокусувались на поверхню зразку кремнію в пляму діаметром 1,2 – 3 мм, розподіл інтенсивності в якому був близький до гаусового. В даних експериментах використовувались широкосмугові датчики, а тому реєструвались дуже високочастотні акустичні коливання що, як відомо, майже одразу затухають.

З аналізу осцилограми імпульсного фотоакустичного відгуку, зареєстрованого п'єзоелектричним методом при збудженні зразків короткими (8 ns) потужними (10 кВт/см²) імпульсами лазера на парах азота ($\lambda = 337,1$ нм). Двополярність моноімпульсу при цьому пояснюється поширенням в зразку хвилі стиску – розтягу, а багатократно повторюваний акустичний "дзвін" – перевідбиванням акустичних хвиль на шляху їх слідування від зразка через сапфіровий звукопровід до датчика. В даній роботі п'єзоелектричним методом досліджувались енергоперетворюючі процеси в системі, що проходять за участю електронних збуджень на фоні звичайного фототермоакустичного – ефекту. Теплові хвилі генеруються за рахунок опромінення речовини модульованим світлом, яке, поглинаючись, нагріває його із змінною температурою. Даний ефект ґрунтується на теорії пружності. Реєструються акустичні хвилі поширенням і чутливим п'єзоелектричним методом.

УДК 666.3-1-026.66-022.532-026.771

ЕЛЕКТРОМАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ КЕРАМІЧНИХ НАНОПОРОШКІВ

Л.Л. Сартинська

*Інститут Проблем Матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України,
адреса: вул. Омеляна Прицака (Кржижановського) 3, м. Київ, 03142, Україна,
e-mail: l.sartinska@ipms.kyiv.ua*

В роботі розглянуто взаємодію керамічних нанопорошків з електромагнітним полем. Показано, що свіжоприготовані нанопорошки можуть взаємодіяти з магнітним полем або мати парамагнітні властивості завдяки присутності некомпенсованих зв'язків на поверхні. Їх компенсація за рахунок насичення поверхні киснем приводить до втрати парамагнітних властивостей.

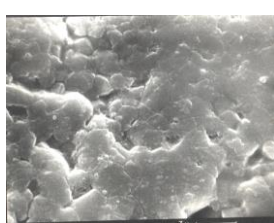
Відомо, що видатні та виняткові фізико-хімічні властивості матеріалу можуть виникати, коли його розмір зменшується до нанорозміру. Серед багатьох типів нанопорошків особливо значну увагу приділено керамічним наноструктурам, оскільки вони дуже стабільні, а шляхи їх синтезу добре відомі та відносно дешеві [1].

Поверхневі ефекти впливають на перші десятки атомних шарів під поверхнею, що визначають вищу атомну щільність, нижчу енергію активації для фізико-хімічних реакцій, зміни в енергії поверхні і відмінні термомеханічні, електромагнітні та оптичні властивості. Оскільки більшість хімічних реакцій відбувається на поверхнях, нанопорошки набагато більш реакційно здатні, ніж у вигляді твердого тіла.

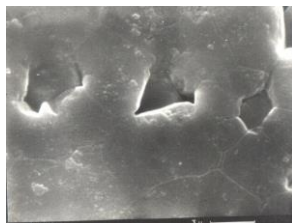
В якості вихідних досліджуваних нанопорошків і матеріалів на їх основі використовувались Si₃N₄, Si₃N₄-TiN, Al₂O₃, Si₃N₄-Al₂O₃, Si₃N₄-Y₂O₃, отримані плазмохімічним синтезом (Рига, ИНХ Латвія), нанопорошок α -Al₂O₃ високої чистоти, 99,9%, (Sumitomo АКР-50, Японія) та нанопорошок BN, отриманий в оптичній печі під дією концентрованого світлового випромінювання.

Зразки із плазмохімічних нанопорошків та нанопорошків на основі $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ були отримані гарячим пресуванням під дією індукційного нагріву [2] [3]. Гаряче пресування плазмохімічних порошків проводили при температурі 1820 °С. Диски із нанопорошків на основі $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ були виготовлені при різних температурах (1300-1720 °С). Випробування різців із плазмохімічних нанопорошків проводили при точінні загартованих сталей [4] [2]. Вологу ерозію дисків із нанопорошків на основі $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ досліджували завдяки модифікованому високошвидкісному млину за спеціальною технологією. Нанопорошки BN були отримані при нагріванні поверхні вихідних порошків бору в печі високої інтенсивності оптичної енергії в потоці азоту. Склад і структура вихідних порошків та отриманих зразків аналізувалась за допомогою СЕМ. Спектри електронного парамагнітного резонансу (ЕПР) записували за допомогою спектрометра EPR ELEXIS 580 при кімнатній температурі.

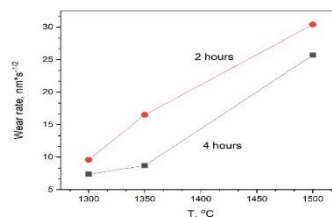
Нанопорошки BN та плазмохімічні нанопорошки одразу після процесу синтезу відрізнялись наелектризованістю і легко переміщувались під впливом магнітного поля. Гарячепресовані матеріали із нанопорошків на основі $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ отримані при індукційному нагріві продемонстрували присутність зміцненого шару на поверхні зразка при нагріванні при низьких температурах, який відрізнявся дрібною структурою та підвищеною стійкістю до зношування (Рис. 1). При високих температурах цей ефект пропадав [3]. Саме тому матеріали, отримані із плазмохімічних порошків під впливом індукційного нагріву при високих температурах не мали ніяких особливостей у досліджуваних властивостях крім відмінності у кольорі внутрішньої і зовнішньої поверхні зразка (Рис. 2 а, б) [2].



а



б



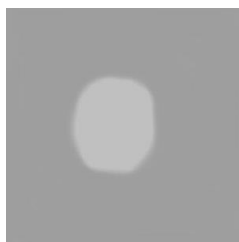
в

Рисунок 1. Структура гарячепресованого зразка на основі $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ на поверхні (а), всередині (б) та його зносостійкість (в)

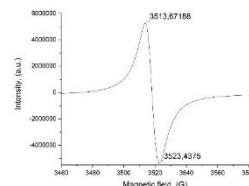
Нанопорошки BN, які були отримані в печі високої інтенсивності оптичної енергії в потоці азоту, проявляли парамагнітні властивості після синтезу (Рис. 2 с). Перебування цих нанопорошків в незахищеному середовищі на протязі року привело до насиченню їх киснем і зникненню парамагнітних властивостей. У плазмохімічних нанопорошків теж збільшувалась кількість адсорбованого кисню від 2 ваг. % до 5 ваг. % в незахищеному середовищі, що приводить до зникнення наелектризованості і взаємодії з магнітним полем.



а



б



в

Рисунок 2. Товщина темної ділянки зразків на основі плазмохімічних порошків від часу витримки гарячого пресування: (а) — 1 хв, (б) — 8 хв. та спектр ЕПР нанопорошку BN, отриманого в оптичній печі (в)

Завдяки розвиненій поверхні нанопорошків і утворенню обірваних або незаповнених зв'язків під час синтезу нанопорошки можуть мати парамагнітні властивості. Насичення поверхні киснем і балансування некомпенсованих зв'язків киснем приводить до їх втрати.

1. R. Wang, "The chemistry of nanomaterials - C. N. R. Rao, A. Müller, A. K. Cheetham (eds), WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim 2004. ISBN 3-527-30686-2, 741 pages," *Colloid Polym. Sci.*, vol. 283, no. 2, p. 234, 2004, doi: 10.1007/s00396-004-1140-1.
2. L. L. Sartinska, "Effect of Induction Heating on Surface Properties of Hot-Pressed Ceramics Based on Nanopowders Si₃N₄ and TiN," *Powders*, vol. 2, no. 4, pp. 697–708, Oct. 2023, doi: 10.3390/powders2040043.
3. L. L. Sartinska, "Influence of grain boundaries on the properties of dense alumina ceramic," *Key Eng. Mater.*, vol. 206, pp. 1141–1144, 2001, doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.206-213.1141.
4. G. G. Gnesin, I. I. Osipova, and L. L. Sartinskaya, "Ultradispersed nitride powder-base ceramic tool materials," *Powder Metall. Met. Ceram.*, vol. 29, no. 12, pp. 1011–1014, 1990, doi: 10.1007/BF00793390.

Секція 3. Проблемні питання твердотільної електроніки

УДК 678.027.3

ЗАСТОСУВАННЯ ЛЮМІНЕСЦЕНТНИХ ДЕТЕКТОРІВ У СФЕРІ РЕТРОСПЕКТИВНОЇ ДОЗИМЕТРІЇ

О.В. Балюк, Р.Ю. Гапончук, М.В. Бондарчук, О.В. Замуруєва

Волинський національний університет імені Лесі Українки м. Луцьк, вул. Банкова, 9
olaibaluk@gmail.com

У випадку радіаційної події важливо оцінити дозу радіації, яку отримано. Необхідно швидко та точно визначити дози радіації, що були випадково накопичені, для того, щоб медичні установи могли відповідно ідентифікувати осіб, які були опромінені, а потім надавати їм відповідне лікування. У випадку радіаційного опромінення потрібен метод визначення поглиненої дози, якщо стандартні детектори були недоступні під час інциденту [1].

Однією з таких методик є ретроспективна дозиметрія, яку можна назвати «дозиметрією без дозиметра», що є одним з найважливіших інструментів «аварійної дозиметрії». Цей метод використовується для визначення дози радіації після опромінення, якщо стандартні детектори були недоступні під час інциденту. У ситуаціях, коли комерційні детектори недоступні, шукають альтернативні матеріали, які можуть використовуватися як аварійні детектори [2]. У зоні ураження є ряд об'єктів, які можуть бути застосовані як природні дозиметри. З цією метою досліджувався кварц, матеріали для ремонту зубів, цегла, гіпсокартонні плити для стін, цемент, ліки, компоненти мобільних телефонів, SIM-карти, інтегральні схеми, банківські картки, банкноти, монети, нігті, зубна емаль, годинникове скло, скляні пляшки, крила комах, порцеляна, пил, кухонна сіль та інші. Застосовувані в ретроспективній дозиметрії матеріали повинні мати високу радіаційну чутливість, а також відповідати спеціальним вимогам для екстреної дозиметрії, таким як швидка підготовка проб і надійність вимірювання [3].

Аналіз досліджень, щодо матеріалів, які можуть використовуватись в ретроспективній дозиметрії, показав, що певні електронні частини мобільного телефону придатні як аварійні дозиметри. Окрім електронних компонентів на друкованій платі, скло з дисплеїв мобільних телефонів також виявилось потенційно корисним як дозиметричний матеріал.

Було встановлено, що при травленні зразків скла плавиковою кислотою (HF) спостерігається велике зниження (на 74, 56, 62% для Iphone 7, TECNO spark 6 та Xiaomi відповідно) сигналу нульової дози. Встановлено чутливість досліджуваних зразків Iphone, Tecno Spark та Xiaomi для поглиненої дози 1 Гр: 10,2 мкКл/(Гр·г), 1,84 мкКл/(Гр·г), 0,39 мкКл/(Гр·г) відповідно. Досліджувані зразки мають лінійну дозову залежність, що є важливим для дозиметрів. Дослідження продемонструвало потенціал комерційно доступних репрезентативних брендів зразків екранів телефонів для ретроспективної дозиметрії («дозиметрії аварій»). Встановлено, що серед досліджених матеріалів зразок екрана Iphone є найбільш перспективним для цілей ретроспективної дозиметрії.

Отже, люмінесцентні детектори використовуються в ретроспективній дозиметрії для вимірювання дози іонізуючого випромінювання, що накопичилася в матеріалах протягом певного часу. Ці детектори здатні виявляти та аналізувати світлові сигнали, які виникають в результаті взаємодії випромінювання з матеріалом детектора.

1. Давидюк Г.Є., Мирончук Г.Л. Радіація і людина / Навч.посіб. Луцьк: Ред.-вид. від. „Вежа” Волин. націон. ун-ту ім. Лесі Українки, 2010. 303с.
2. Ademola J.A., Woda C. 2017. Thermoluminescence of electronic components from mobile phones for determination of accident doses. Radiat. Meas. 2017. V.104. 13–21.

3. Alyahyawi A., Siti Rozaila Z., Siti Shafiqah A.S., Sabtu S.N., Alsubaie A., Alanazi A., Daar E., Abdul Sani S.F., Bradley D.A. Investigation of silica-based TL media for diagnostic x-ray dosimetry. Radiat. Phys. Chem. 2017. V.140. P.78–82.

UDC 530.1

QUANTUM SENSORS AND APPLICATIONS

Prof. Vincenzo Berardi

Politecnico di Bari, Bari (Italy)
e-mail: vincenzo.berardi@poliba.it

Quantum sensors leverage quantum mechanical properties such as superposition, entanglement, and quantum coherence to achieve highly precise measurements beyond classical limits. This report will highlight the status and application of quantum sensors in various fields by focusing on advancements in atomic clocks, magnetometers, and gravimeters.

It will also be shown the potential benefit of offering unprecedented performance in diverse sectors paving the way for practical and large-scale deployment of quantum sensors in real-world applications.

УДК 004.056

ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ТЕОРІЇ ХАОСУ ТА ЇЇ ЗАСТОСУВАННЯ В ЦИФРОВИХ ТЕХНОЛОГІЯХ

І. Вольська, С.А. Федосов

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

Теорія хаосу є розділом математики та фізики, що досліджує поведінку динамічних систем, які здаються випадковими, хоча підкоряються детермінованим законам. Ця теорія знаходить широке застосування в різних наукових та технічних галузях, включаючи цифрові технології.

Основні поняття теорії хаосу включають чутливість до початкових умов, нелінійність, фрактальну структуру та детермінованість. Чутливість до початкових умов, також відома як «ефект метелика», означає, що невеликі зміни в початкових умовах системи можуть призвести до значно різних результатів. Це явище підкреслює непередбачуваність довгострокової поведінки системи. Хаотичні системи часто описуються нелінійними рівняннями, де зміни вхідних параметрів призводять до непропорційних змін у вихідних, що ускладнює аналіз і прогнозування таких систем. Багато хаотичних систем мають фрактальні аттрактори, які демонструють самоподібність на різних масштабах. Ця властивість дозволяє моделювати складні структури та процеси. Попри хаотичну поведінку, система підкоряється строгим математичним законам, що означає, що при точному знанні початкових умов можна точно передбачити подальший розвиток системи, хоча це практично неможливо через чутливість до початкових умов.

Теорія хаосу знайшла своє застосування в багатьох аспектах цифрових технологій, зокрема у криптографії, обробці сигналів, мережевій безпеці, машинному навчанні та управлінні складними системами. У криптографії хаотичні системи використовуються для створення високоякісних випадкових чисел, що є ключовим для криптографічних алгоритмів. Випадковість хаотичних систем забезпечує надійний захист даних. Використання хаотичних мап у шифрувальних алгоритмах підвищує безпеку передачі інформації завдяки непередбачуваності хаотичних процесів. В обробці сигналів хаотичні сигнали можуть бути

використані для ефективного стиснення даних, зберігаючи високу якість інформації та зменшуючи обсяг збережуваних даних. Хаотичні моделі допомагають у відновленні пошкоджених або загублених сигналів, використовуючи властивість детермінованості для

реконструкції відсутніх частин. У мережевій безпеці та виявленні аномалій хаотичні моделі допомагають виявляти відхилення від нормальної поведінки у мережевому трафіку, що є корисним для виявлення кібератак та інших загроз. Моделювання поведінки комп'ютерних мереж за допомогою теорії хаосу дозволяє краще зрозуміти їхню динаміку та передбачати можливі проблеми. Цифрові фільтри, розроблені з використанням хаотичних алгоритмів, забезпечують високу якість обробки сигналів у реальному часі. Принципи теорії хаосу також використовуються для створення ефективних алгоритмів управління складними технологічними процесами, підвищуючи їх стабільність та надійність. У машинному навчанні та штучному інтелекті хаотичні моделі дозволяють більш точно моделювати складні динамічні системи, що сприяє покращенню точності прогнозів. Використання хаотичних функцій активації у нейронних мережах може покращити результати у задачах класифікації та регресії.

Теорія хаосу є потужним інструментом для аналізу та розуміння складних динамічних систем. Її застосування в цифрових технологіях дозволяє вирішувати складні завдання в криптографії, обробці сигналів, мережевій безпеці та інших галузях, підвищуючи ефективність і надійність технологічних рішень. Завдяки своїм унікальним властивостям, теорія хаосу відкриває нові горизонти у розвитку сучасних цифрових технологій.

УДК 625.7

GPS: ПРИНЦИПИ РОБОТИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ПРАКТИЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ

А. Глушпенко, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

Протягом усієї історії існування людей, визначення поточного місцезнаходження, було справою не з простих. Особливо, якщо знаходишся в незнайомому місті, чи навіть країні. Сьогодні з цим набагато легше, адже появились системи глобального супутникового позиціонування – від англ. *Global Position System (GPS)*.

Глобальна система позиціонування GPS є невід'ємною частиною нашого сучасного світу, використовується в найрізноманітніших галузях, починаючи від навігації транспортних засобів і закінчуючи геодезією та науковими дослідженнями.

Розпочнемо з основних принципів його функціонування системи глобального супутникового позиціонування. GPS складається з трьох основних сегментів. Супутниковий сегмент включає 24 супутники, які обертаються навколо Землі на орбіті. Точніше, вони розташовані саме на високій орбіті, приблизно на висоті 20 000 км. І це дозволяє їм охоплювати велику площу поверхні Землі. Управлінський сегмент включає наземні станції, котрі відомі як контрольно-коригувальні станції. Вони відповідають за керування та коригування супутників, а також за поширення точного часу. І останній, сегмент користувача. Він включає всі GPS-приймачі, які можуть отримувати сигнали від супутників, щоб визначати своє місцезнаходження.

Принцип роботи GPS базується на математичній концепції триангуляції. Приймачі, наприклад навігатори, отримують сигнали мінімум від трьох супутників, а потім використовують дані часових затримок для розрахунків, результати яких дають визначити відстані до кожного супутника. Супутники постійно надсилають нові сигнали, котрі містять інформацію про час відправки, тобто завжди оновлюють ці дані. Приймачі GPS фіксують час, коли отримують сигнал, і розраховують часову затримку між моментом відправки та

моментом отримання сигналу. Кожна сигнальна хвиля, яка приходить від супутника, може бути розглянута як сферична хвиля, що поширюється у всіх напрямках від супутника. Таким чином, коли приймач отримує сигнал від трьох супутників, він може визначити своє місцезнаходження там, де сфери перетинаються. Так як сигнали потребують певного часу для того, щоб подолати відстань між супутником і приймачем, будь-які затримки у відправленні або прийманні сигналу можуть призвести до неточності у визначенні місцезнаходження. Для цього GPS-приймачі також можуть корегувати ці затримки, для досягнення більшої точності.

Застосовувати GPS можна в дуже широкому переліку сфер. Від простого особистого користування, застосування в наукових дослідженнях, і до над важливого військового. Даліше буде саме про застосування навігаційних систем у різних сферах життя людей.

Перше що спадає на думку при згадці про GPS, це навігатор в машині. Знаходити оптимальний шлях пункту призначення, отримувати інструкції з руху, уникати трафіку та інших перешкод на дорозі. Всі ці можливості нам дає система супутникового позиціонування.

Також GPS використовують і в сфері логістики. Зокрема, для відстеження руху вантажних чи пасажирських засобів. Моніторингу поставок, планування маршрутів, та загальної оптимізації роботи транспортної системи.

Ще одна сфера вміщає в собі повітряну та морську навігацію. Точне визначення місцезнаходження суден і літаків, також є важливою та відповідальною задачею. Адже від цього залежить не тільки ефективність тих чи інших маршрутів цих транспортів, а і їхня безпека. І в геодезії з картографією GPS відіграє значну роль. Він банально спрощує дослідження в цих науках. Адже може визначати географічні точки, і робити це доволі точно. У свою чергу, це вже дозволяє картографам створювати точні карти, котрі потім будуть використовуватись в багатьох галузях.

Наступна сфера, не надто очевидна, однак, чи щодня користуємося результатами її дослідницької роботи. Метеорологія, саме системи супутникового позиціонування використовують у вимірюванні змін рельєфу, і моніторингу клімату та природних явищ. Крім цього, GPS використовують і для моніторингу землетрусів, та інших геологічних явищ, допомагаючи вченим розуміти природу цих явищ та передбачати їхні наслідки для людей і природи.

GPS також є важливою складовою системи навігації для військових цілей. Військові використовують GPS для розвідки, визначення місцезнаходження ворогів, навігації та координації військових дій.

Завершую це список найбільш побутове, загальновживане використання. Наприклад, в смартфонах, спортивних годинниках, та інших електронних засобах, для трекінгу активності, місцезнаходження, геотування фотографій та в багатьох інших цілях.

Виходячи із всіх попередніх пунктів результатів, зрозуміло, що стежать за нами достатньо. Звісно, втручання в особисте життя, недопустимо, однак, зазвичай користувачі самі і дають на це дозвіл. Однак із цього можливо винести і позитив. Не тільки для тих, хто стежить за нами, а і нам самим.

Однією з можливостей навігаційних технологій, є розвиток інтерактивних систем навігації, що відкриють нові форми туризму. Це, наприклад, може включати в створення персоналізованих маршрутів, які враховують індивідуальні вподобання користувача та його історію маршрутів. Чому б нею не скористатися? Також можливі створення аудіо-гідів та віртуальних екскурсій, які би використовували GPS для автоматичного надання інформації про місцевість, прямо під час подорожі.

Висновки. Глобальна система позиціонування є одним із ключових інструментів у нашому житті, вона змінила спосіб, яким ми взаємодіємо зі світом. Від навігації транспортних засобів до наукових досліджень, GPS має безліч застосувань і продовжує розвиватися. І з кожним роком дає нам все більш точні та ефективні інструменти, які роблять наше життя все зручнішим.

1. Cai C., Lv K., Cai Y., ...Wu M., Cheng L. A static precise single-point positioning method based on carrier phase zero-baseline self-differencing. *Scientific Reports*. 2024. Vol. 14, № 1. 12590.
2. Midoglu C., Kjærang Winther A., Boeker M., ...Riegler M.A., Halvorsen P. A large-scale multivariate soccer athlete health, performance, and position monitoring dataset. *Scientific Data*. 2024. Vol. 11, № 1. 553.
3. Geiger A., Lenz P., Stiller C., Urtasun R. Vision meets robotics: The KITTI dataset. *International Journal of Robotics Research*. 2013. Vol. 32, № 11. P. 1231–1237.
4. Bulusu N., Heidemann J., Estrin D. GPS-less low-cost outdoor localization for very small devices. *IEEE Personal Communications*. 2000. Vol. 7, № 5. P. 28–34.

УДК 621.382

TEMPERATURE-DEPENDENT IMPEDANCE SPECTROSCOPY OF A GeSn FILM

O.I. Datsenko, C.V. Kondratenko, A.A. Pocherpailo, P.O. Kovanzhi

*Physics Faculty, Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, 64/13 Volodymyrska St., Kyiv, Ukraine,
e-mail: oleksandr.datsenko@knu.ua*

Along with Si, Germanium is a semiconductor prevalent in electronics. These materials are indirect-gap, which is a noticeable drawback for their application in optoelectronics, as they reveal relatively low edge absorption and weak emission. However, adding more than 6% Sn to Ge makes the material direct-gap [1]. Furthermore, the bandgap and, hence, absorption edge shifts deeper to the infrared, widening the working range of the optoelectronic device. In addition, the material demonstrates conductivity much higher than the crystalline Ge due to lower bandgap.

In this work, a GeSn film with Sn content of 12 percent was studied by impedance spectroscopy at different temperatures from 83 to 280 K. The ~800 nm thick film was grown by CVD above a Ge buffer on a Si substrate. Two lateral ohmic contacts of InGa eutectic were formed at the surface of a $2 \times 10 \text{ mm}^2$ structure. A buffer Ge layer on Si substrate was also studied as a reference sample.

The impedance $Z = Z_1 + i \cdot Z_2$ spectra were studied at different temperatures. As a result, the dependencies of real Z_1 and imaginary Z_2 parts on frequency f were obtained within a range from 1 to 10^3 kHz (Figure 1). Both the studied structures show a decrease of active resistance Z_1 with the increase of both frequency and temperature, herewith, the GeSn one at low frequencies and temperature demonstrates the values of resistance lower than the reference sample.

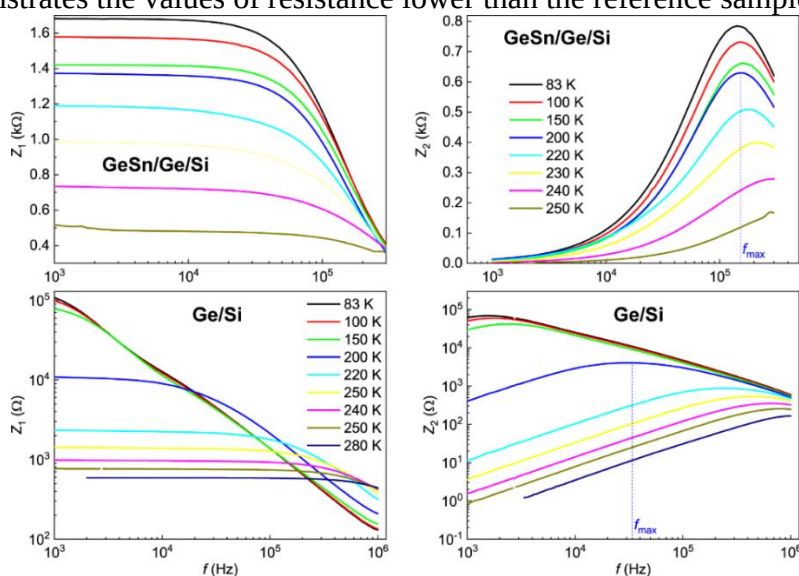


Fig. 1. Spectra of real (left) and imaginary (right) parts of the impedance for GeSn/Ge/Si (up) and reference (down) structures at different temperatures. The vertical dashed lines illustrate determination of the frequency at the Z_2 peak for 200 K.

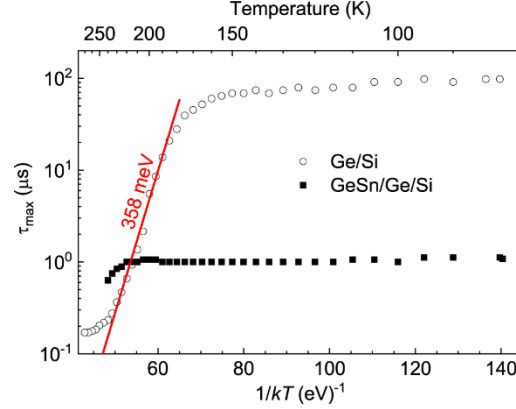


Fig. 2. Arrhenius plot of the relaxation times with temperature in the studied structures.

The dependencies of Z_2 are non-monotonous, having a maximum, which position $f_{\max}$ depends on temperature. It allows us to calculate the carrier relaxation time as $\tau_{\max} = (2\pi f_{\max})^{-1}$, their dependencies on temperature for both GeSn/Ge/Si and reference Ge/Si structures are given in Figure 2. The former structure at lower temperatures reveals relaxation two orders faster than the reference structure. The relaxation time is known to depend on temperature as $\tau = \tau_0 \cdot \exp[E_a \cdot (k_B T)^{-1}]$, where τ_0 is pre-factor, E_a is the activation energy and k_B is Boltzmann constant [2], the slope of dependence of τ versus T^{-1} allows to estimate the activation energy of the conductivity to be ~ 360 meV at least for the reference sample. This value is close to the half of Ge bandgap of 0.74 eV at 0 K [3].

Figure 3a presents Nyquist plots (Z_2 vs Z_1) for the GeSn/Ge/Si structure. The value $Z_1(f) = R_1$ at the point $Z_2(f) = 0$ is the active resistance of the structure. As seen in Fig. 3b, the T -dependences of active conductance $\sigma = 1/R_1$ for both structures are different. The conductance for the reference structure, highly decreasing with temperature, is semiconductor-like, while that for the GeSn sample gets a plateau below ~ 200 K. Obviously, the semiconductor Ge/Si virtual substrate predominantly contributes to the conductivity of GeSn/Ge/Si at higher temperatures, while the low-temperature conductivity is mainly due to the surface metal-like GeSn film.

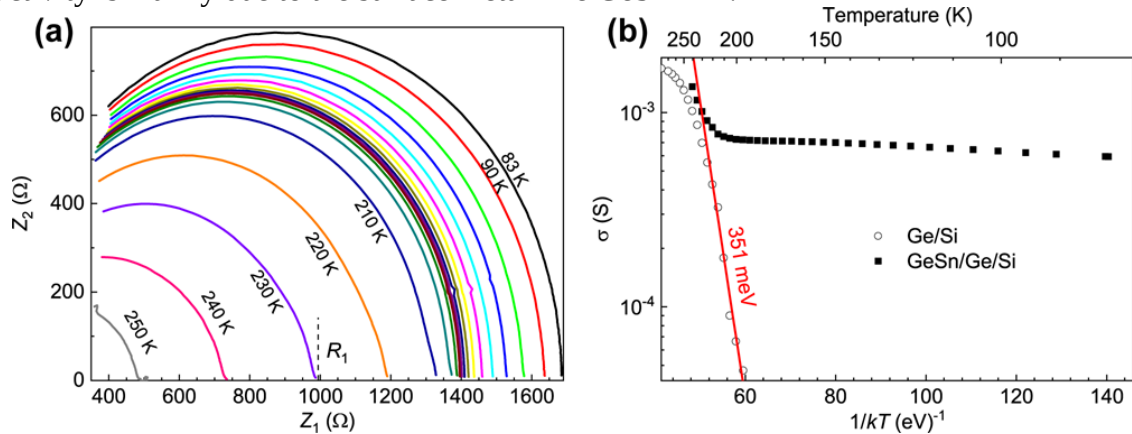


Fig. 3. (a) Nyquist plots for the GeSn/GeSi structure within temperatures 83-250 K (b) Arrhenius plots of active conductance with temperature in the studied structures.

The active conductance is known [2] to be temperature-dependent as $\sigma = \sigma_0 \cdot \exp[-E_a \cdot (k_B T)^{-1}]$. The respective Arrhenius plot of this value for the reference sample in Figure 3b revealed the activation energy similar to that obtained from Figure 2.

The work is supported by the National Research Foundation of Ukraine (2023.03/0060).

1. K. L. Low, Y. Yang, G. Han, W. Fan, and Y.-C. Yeo, Electronic band structure and effective mass parameters of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloys, J. Appl. Phys. 112, 103715 (2012).
2. D. Das and S. Samanta, Complex dielectric characteristics, ac-conductivity, and impedance spectroscopy of B-doped nc- $\text{SiO}_x\text{:H}$ thin films, ACS Appl. Electron. Mater. 3(4), 1634–1647 (2021).
3. C. Kittel, Introduction to Solid State Physics (6th Ed., New York: John Wiley, 1986), p. 185.

ФІЗИКА ТВЕРДОГО ТІЛА ЯК ВАЖЛИВА СКЛАДОВА ФІЗИЧНИХ ОСНОВ ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ

І. Доля, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

Фізика твердого тіла – розділ фізики конденсованих середовищ, що охоплює експериментальне та теоретичне вивчення структури, фізичних властивостей та кінетичних явищ в кристалічних і аморфних середовищах, вивчення впливу зовнішніх полів, іонізуючої радіації, потоків частинок на мікро- та макропроцеси при різних умовах. Дослідження використовують методи або містять результати, що можуть бути використані для матеріалів різних типів. Фізика твердого тіла зводиться, по суті, до встановлення зв'язку між властивостями окремих атомів і молекул і властивостями, які виявляються при об'єднанні атомів або молекул в гігантські асоціації у вигляді регулярно-впорядкованих систем – кристалів. Ці властивості можна пояснити, спираючись на фізичні моделі твердих тіл.

Фізика твердого тіла є однією з ключових галузей фізики, що вивчає властивості твердих матеріалів і має велике значення для розробки нових електронних пристроїв. Сучасні напівпровідникові пристрої, такі як транзистори, світлодіоди, сонячні батареї та інші, стали можливими завдяки досягненням у цій сфері. Фізика твердого тіла досліджує різноманітні властивості матеріалів, включаючи електричні, магнітні, теплові та механічні характеристики. Одним із найважливіших аспектів є вивчення кристалічної структури матеріалів. Більшість твердих тіл, що використовуються в електроніці, мають кристалічну структуру, де атоми розташовані в регулярній решітці. Ця структура визначає багато фізичних властивостей матеріалу.

Напівпровідники займають особливе місце в електроніці завдяки їх унікальним електричним властивостям. Вони мають вузьку заборонену зону, що дозволяє легко керувати їх провідністю за допомогою домішок або зовнішніх впливів, таких як температура та світло. Найвідомішим напівпровідниковим матеріалом є кремній, який використовується для виготовлення більшості електронних пристроїв.

Транзистори є основними компонентами сучасної електроніки. Вони використовуються для підсилення та перемикання електричних сигналів. Існує кілька типів транзисторів, але найпоширенішими є біполярні транзистори та польові транзистори (FET). Робота транзисторів базується на принципах фізики твердого тіла, зокрема на контролі руху електронів і дірок у напівпровідникових матеріалах.

Світлодіоди (LED) та лазери є прикладами пристроїв, що використовують явища електролюмінесценції та стимульованої емісії. У світлодіодах електрони рекомбінують з дірками в напівпровідниковому матеріалі, випромінюючи світло. У лазерах цей процес здійснюється в контрольованих умовах, що дозволяє отримати монохроматичне і когерентне світло.

Сонячні батареї використовують фотогальванічний ефект для перетворення сонячного світла в електричну енергію. В основі цього процесу лежить створення електронно-діркових пар у напівпровідниковому матеріалі під дією світла та поділ цих пар за допомогою електричного поля, що генерує електричний струм.

Фізика твердого тіла є фундаментальною наукою, що дозволяє створювати і вдосконалювати електронні пристрої, які стали невід'ємною частиною нашого життя. Вивчення властивостей матеріалів і розуміння їх поведінки на атомному рівні відкриває нові можливості для інновацій у різних галузях, від комунікацій до енергетики. Технології, розроблені на основі досліджень у фізиці твердого тіла, продовжують змінювати світ, роблячи його більш ефективним і взаємопов'язаним.

ПРИНЦИП РОБОТИ І МОЖЛИВОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ 3D ПРИНТЕРА

В.С. Мороз , С.А. Федосов , Ю.В. Коваль

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

3D-принтер – це пристрій, який займається створенням об’єктів у тривимірному просторі із заданих йому моделей. Під час виконання свого завдання він виконує послідовну роботу вкладаючи матеріал один за одним, створюючи об’ємні об’єкти. 3D-принтер використовується у різних галузях, таких як медицина (протези), архітектура (моделі будинків), військовий сектор (дрон). У сьогоднішній ця тема є досить актуальною для кращого розуміння принципу роботи 3D-принтера, його застосування, переваги та обмеження у використанні.

Перші кроки у дослідях у сфері переміщення цифрових моделей у фізичні були помітні на початку XX століття. Відправною точкою у розвитку 3D-принтерів вважаються 1980-і роки, коли Чарльз Халл показав концепцію стереолітографії. Це і стало початком нового революційного розвитку у сфері друку. Саме Чарльз запропонував створення об’єктів за допомогою полімерів, які набували твердості під дією лазерного випромінювання. Наступне десятиліття вчені вдосконалювали цей метод покращуючи як матеріали так і сам метод побудови об’єктів.

Принцип роботи 3D принтера. 3D принтери поділяються на два види, це фотополімерний і філаментний. Основний процес створення моделей яким користуються більшість принтерів – це FMD (пошарове накладання пластику). Їхня відмінність у тому, що фотополімерний використовує тонкий прут пластику, а філаментний використовує рідку фотополімерну смолу.

Для більш класичного фотополімерного принтера сучасний асортимент матеріалів для 3D-друку є дуже широкий. І в залежності від потреб, чи це прототип чи макет, чи має він вигинатись або має бути термостійкий і витримувати навантаження, при виборі потрібно враховувати усі фактори. Найбільш популярний вид пластику є PLA біорозкладний термопластичний полієфір, що одержують на основі молочної кислоти. Використовується для 3D-друку та у виробництві біопластику. Це біорозчинний і біоактивний термопластик, отриманий з відновлюваних ресурсів: кукурудзяного крохмалю, кореня маніоки, гранул крохмалю та цукрової тростини.

Основні компоненти принтера – це:

нагрівальний пристрій, який нагрівається до заданих йому температур, оскільки різні види пластику потребують різну температуру;

сопло-накінецьник нагрівального пристрою, через який виходить нагрітий пластик;

радіатор, оскільки гарячим пластик має бути лише на кінці,

а також сам прилад подачі пластику.

Узагальнена назва усіх деталей принтера – хотенд. За переміщення його у просторі відповідають мотори, три з яких відповідають за переміщення вздовж трьох осей а один за подачу пластику, якими у свою чергу керує мікрокомп’ютер.

Технологія друку. Посередником між людиною та принтером є слайсер – програми для створення послідовних команд при створенні моделей. Файли для 3D принтера зберігаються у форматі STL, але сама інструкція побудови зберігається у форматі gcode. Лише після надання файлу з інструкцією принтер починає свою роботу.

Застосування 3D друку у різних сферах.

Якщо ви уявляєте, що 3D-принтер це маленький пристрій то це не так. У будівництві використовуються великі принтери, які самі можуть будувати будинки методом послідовного

накладання бетону, що дозволяє за короткий проміжок часу використовуючи мінімальну кількість людського ресурсу швидко та якісно будувати стіни будинків.

У медицині 3D-принтер дозволяє створювати різні людські органи, які студенти-медики можуть досконало розглянути для розуміння кращої будови організму та створення плану послідовності операції. Створення різних корсетів, імплантів і протезів. До перспективних методів друкування можна віднести створення заміників судин, живих тканин та органів.

Важкі часи для України показали нам важливість 3D-принтерів у військовій сфері. Важко уявити наскільки багато деталей можуть створювати ці пристрої задля знищення ворога та збереження життя нашим героям. За допомогою цих принтерів можна створити різні види холодної зброї та оболонку для вибухівки тощо. Одним з прикладів 3D-друку є створення дронів або запчастин до них, різні прилади для заряджання обойми, створення протипіхотних бомб, конектори для Starlink, стартові платформи для дронів та скиди для безпілотників.

Переваги 3D друку є індивідуалізація, швидкість виготовлення, економія тощо.

Індивідуалізація проявляється у створенні предметів враховуючи індивідуальні потреби та особливості.

Швидкість виготовлення – процес створення об'єктів на 3D-принтері є швидший за інші методи, що дає можливість вчитись на помилках за менший проміжок часу у випадку невдалого кінцевого об'єкту.

Вартість: не потрібно витрачатись на прилади за допомогою яких можна створити окремі деталі. У 3D-принтера єдина витрата це пластик або матеріал який він використовує для створення моделей.

Екологічність: у сучасному суспільстві це дуже важливий аспект, оскільки наприклад пластик який використовує принтер, а саме більшість їх видів створені з екологічно чистих інгредієнтів.

Доступність: дає можливість проявляти себе як креативну людину та втілювати потреби в реальність.

Обмеженнями 3D друку є вартість, якість друку, обмеження матеріалів тощо.

Вартість: в середньому один кілограм пластику коштує 800 гривень – це як плюсом так і мінусом оскільки деякі деталі можуть бути створені іншим методом і при цьому будуть дешевші. Та і сам принтер не є дешевим.

Якість друку: залежить від швидкості друку, чим складніший є об'єкт тим повільніше він має створюватись задля кращого зображення.

Розміри: класичні принтери не є великих розмірів, що обмежує нас у розмірі проєктів.

Авторські права: 3D-принтер дає можливість створювати те, що люди продають, як наслідок іде зменшення продажів і скорочення робочих місць.

3D-принтер – це технологічний прорив у сфері друку. Технологія 3D друку є досить потужною та корисною у сьогоденні, оскільки вона відкриває багато можливостей у найрізноманітніших галузях, від протезів і простих моделей до людських органів. Також не потрібно забувати що вироби є екологічні, що важливо у сучасному суспільстві. Тому сподіваємося що технології друку дійдуть до таких вершин, що не буде обмеження у реальності надрукування будь чого.

1. <https://artline.ua/uk/blogs/istoriya-sozdaniya-3d-printera>

2. <https://addtitive.com.ua/3d-druk-v-medytyni/>

3. <https://3d4u.com.ua/uk/blog/post/101-preimushchestva-i-nedostatki-3d-pechati>

4. <https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9F%D0%BE%D0%BB%D1%96%D0%BB%D0%B0%D0%BA%D1%82%D0%B8%D0%B4>

УДК 681.58

АНАЛІЗ ФУНКЦІЇ ПЕРЕТВОРЕННЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИХ ДАВАЧІВ

С.А. Мороз, В.Д. Чалий, А.А. Горайчук

Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська, 75,
s.moroz@lntu.edu.ua

Сучасні електронні системи важко уявити без різних давачів фізичних величин. Одними з таких давачів є п'єзоелектричні. Принцип дії п'єзоелектричних давачів заснований на рівняннях п'єзоефекту. Рівняння стану п'єзоелектричній середовища виводяться з виразів для термодинамічних потенціалів, які представляються у вигляді розкладання в степеневі ряди по відповідним незалежним змінним, які визначаються зовнішні механічні, електричні або теплові впливи. Якщо в якості незалежних змінних використовувати механічне напруження σ_i електричне поле ε_m і зміну температури ΔT , то рівняння прямого і зворотного п'єзоефекту в матричній формі мають вигляд:

$$S_i = s_{ij}^{\varepsilon T} \sigma_j + d_{mi}^{\sigma} \varepsilon_m + \beta_i^{\varepsilon \sigma} \Delta T \quad (1)$$

$$D_m = d_{mi}^{\varepsilon T} \sigma_i + \varepsilon_{mk}^{\sigma T} \varepsilon_k + \chi_m^{\varepsilon \sigma} \Delta T \quad (2)$$

де σ_i - компоненти тензора механічних напружень, S_i - компоненти тензора деформації, ($i, j = 1 - 6$), D_m - компоненти векторів напруженості електричного поля і індукції ($m = 1 - 3$), $s_{ij}^{\varepsilon T}$, $\varepsilon_{mk}^{\sigma T}$, $d_{mi}^{\varepsilon T}$ - відповідно пружні, діелектричні і п'єзоелектричні константи, $\Delta \varepsilon$, ΔT - зміна ентropії і температури, ρ - щільність, $c^{\varepsilon \sigma}$ - теплоємність, $\chi_m^{\varepsilon \sigma}$ - піроелектрична постійна, $\beta_i^{\varepsilon \sigma}$ - коефіцієнт лінійного теплового розширення. Індeksi вгорі вказують відповідні граничні умови, при яких проводяться вимірювання.

Співвідношення (2) називається рівнянням прямого, а (1) - зворотного п'єзоефекту.

Структурна і електрична схеми найбільш часто зустрічаються на практиці п'єзоелектричних давачів генераторного типу для вимірювання сили, тиску або прискорення (вібрації) показані на рис. 1. Структурна схема таких давачів, як послідовність вимірювальних перетворювачів, включає перетворювач вимірюваного механічного параметра в зусилля, далі ПЕ, що перетворює зусилля в електричний заряд і електричний ланцюг, що зв'язує ПЕ з узгоджувальним підсилювачем і який перетворює заряд в напругу на вході електронної апаратури.

Електрична схема включає джерело заряду (q) і електричні ємності і опори ПЕ (C_E , R_E), кабелю (C_K , R_K) і вхідного каскаду підсилювача (C_Y , R_Y).

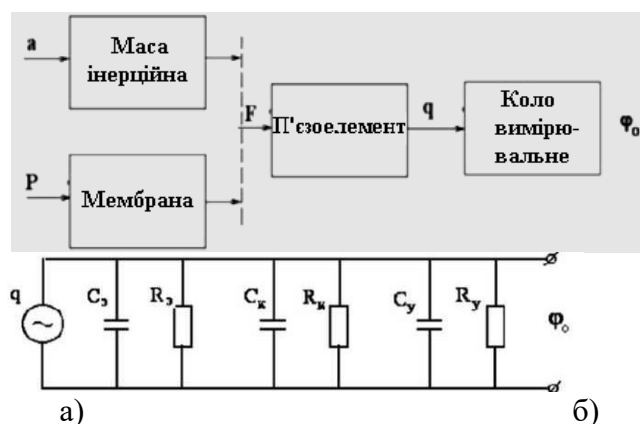


Рис. 1. Структурна (а) та електрична (б) схема п'єзоелектричних давачів

Розглядаючи давач як сукупність елементарних перетворювачів (мембрана, інерційна маса, ПЕ і електричний ланцюг), функцію перетворення зусилля F_1 , яке діє на ПЕ, в напругу

на вході підсилювача φ_0 для частот низьких в порівнянні з частотою резонансу давача представляють у вигляді:

$$\varphi_0(F_1) = \frac{q(F_1)R\omega}{\sqrt{1+R^2C^2\omega^2}} \quad (3)$$

де $q(F_1)$ - заряд, що генерується ПЕ, F_1 пов'язана з інформаційно-змінними параметрами відомими співвідношеннями: для давача тиску $F_1 = L_{\text{ефм}} \cdot P$, для давача сили $F_1 = F$, для акселерометра $F_1 = m_i a$; P , F , a - відповідно вимірний тиск, зусилля та прискорення, $L_{\text{ефм}}$ - ефективна площа мембрани, m_i - інерційна маса, R і C - опір і ємність електричних ланцюгів давача, ω - кругова частота.

У загальному випадку функція перетворення п'єзоелектричних давачів генераторного типу може бути представлена у вигляді лінійної залежності вихідного сигналу q від вимірюваної величини x і частоти механічного процесу ω , а також сукупності впливаючих факторів $x_1, x_2 \dots x_n$ наступним чином:

$$q = K(x, x_1, x_2, \dots x_n)x + b(x_1, x_2, \dots x_n)x \quad (4)$$

де $K(x, x_1, x_2, \dots x_n)$ - коефіцієнт перетворення давача, $b(x_1, x_2, \dots x_n)$ - початкове значення вихідного сигналу при $x = 0$.

Інформативність п'єзоелектричних давачів характеризується динамічним і частотним діапазонами, основною (лабораторною) похибкою і додатковими похибками, які зумовлені дією впливаючих факторів. Верхня і нижня межі динамічного діапазону п'єзоелектричних давачів обмежені відповідно міцністю або нелінійністю властивостей ПКМ і шумами підсилювача.

Частотний діапазон визначається «знизу» постійної часу електричних ланцюгів, а «зверху», з похибкою 5% - однією п'ятою від резонансної частоти механічної системи. Відзначимо, що через релаксацію заряду на низьких частотах п'єзоелектричні давачі генераторного типу непридатні для вимірювання статичних механічних параметрів.

Під динамічним діапазоном розуміється відношення максимального рівня вимірюваного параметра, який сприймається давачем без спотворень до мінімального рівня вимірюваного параметра, еквівалентного шуму. Для того щоб визначити динамічний діапазон вимірювання необхідно оцінити максимальне і мінімальне значення вимірюваної величини.

Поріг чутливості п'єзоелектричних давачів визначається шумами вторинних перетворювачів. Поріг чутливості або мінімальне значення вимірюваної величини можна визначити як відношення середньоквадратичної напруженості шуму до коефіцієнта перетворення давача по відповідному параметру. Для впевненої реєстрації мінімального значення вимірюваної величини необхідно, щоб реєстрований сигнал в 2-3 рази перевищував рівень шуму.

Максимальне значення вимірюваної величини визначається міцністю до змінних навантажень або нелінійністю перетворювача виду енергії, в нашому випадку - ПЕ. При вимірюванні знакозмінних динамічних процесів для виключення появи в ПЕ розтягуючого механічного напруження створюється статичне піджимання пружиною, мембраною або зовнішнім квазістатичним тиском.

Нелінійність і гістерезис функції перетворення для високоякісних п'єзоелектричних давачів в динамічному діапазоні, як правило, не перевищують $\pm 1-2\%$.

1. Zienkiewicz O.C. The finite element method: from intuition to generality // Appl. Mech. Rev. 1970, № 23. P. 249-256.

2. Allik H, Hughes T. J. R. Finite element method for piezoelectric vibration // Int. J. Numer. Meth. Eng. 1970, y. 2, № 2. P.151-157.

3. Kagawa Y., Yamabuchi T. A finite element approach to electromechanical problems with an application to energy trapped end // Surface wave devices. IEEE, SU-23, 1976, № 4. P. 263.

4. ATILA. Finite-element code for piezoelectric and magnetostrictive transducer and actuator modeling. User's Manual/Lille Cedex (France): ISEN, 1997.

5. Kanayata K. Thermal analysis of piezoelectric transformer // IEEE Ultrasonics Symp. 1988. P. 901-904.

УДК 621.383

ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ГОЛОГРАФІЧНИХ МОНІТОРІВ

О.О. Нижник, С.А. Федосов, Л.В. Ящинський

Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com

У сучасному світі швидкого розвитку технологій візуальне відображення інформації стає все більш важливим і вимагає нових підходів до його забезпечення. У цьому контексті голографічні монітори представляють собою перспективний напрямок, що набуває все більшого значення в галузі відтворення зображень та візуалізації даних. Голографічні монітори працюють на основі принципів голографії, яка дозволяє створювати тривимірні зображення без необхідності в спеціальних окулярах або інших пристроях.

Голографічний дисплей – це тип дисплея, в якому для створення віртуального тривимірного зображення використовується дифракція світла. Голографічні екрани відрізняються від інших способів отримання 3D-зображень тим, що вони не потребують будь-яких спеціальних окулярів або зовнішнього обладнання для перегляду зображення.

Голографічні монітори мають ряд переваг перед традиційними дисплеями. Вони більш реалістичні, інтерактивні та можуть відображати більше інформації. Завдяки цьому вони мають потенціал революціонізувати спосіб, яким ми взаємодіємо з комп'ютерами та інформацією.

Принцип роботи голографічного монітора базується на основі явища інтерференції світла. Цей тип дисплея використовує два пучки світла: опорний пучок і предметний пучок. Опорний пучок – це еталонний пучок світла, який не змінюється. Предметний пучок – це пучок світла, який містить інформацію про зображення, яке потрібно створити. Коли ці два пучки світла перетинаються, вони створюють інтерференційну картину. Ця інтерференційна картина потім перетворюється на тривимірне зображення спеціальним матеріалом. Для того щоб побачити голографічне зображення необхідно його записати та в подальшому реконструювати з запису.

На рисунку 1 представлена схема, яка демонструє принцип роботи голографічного монітора.

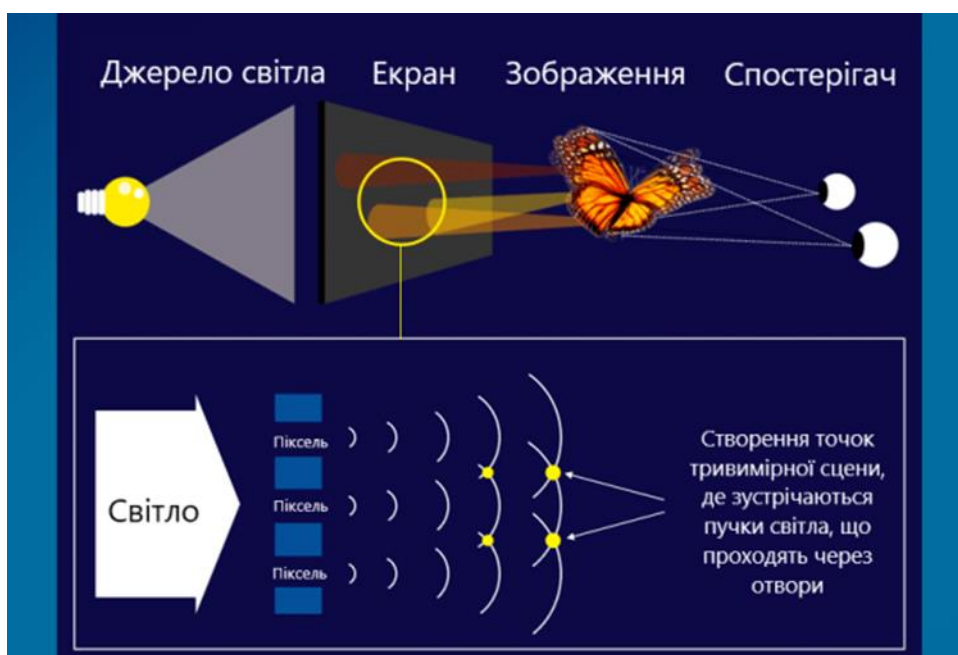


Рисунок 1. Принцип роботи голографічного монітора

Голографія використовує лазерні джерела світла для реконструкції тривимірних зображень. Світло від лазерів зустрічається, щоб створити точку, і безліч таких точок об'єднується, щоб утворити загальну 3D-сцену.

Лазер із когерентним світлом використовується як джерело підсвічування, тоді як пікселі панелі дисплея калібруються та контролюються, щоб світло зустрічалось в певній точці простору для створення точок тривимірної сцени на основі принципу конструктивної інтерференції.

Голографічні монітори пропонують ряд перспективних переваг порівняно з традиційними дисплеями, що робить їх потенційно революційними в багатьох сферах. Розглянемо основні переваги.

Реалістичність: голографічні зображення значно реалістичніші, ніж зображення на традиційних дисплеях. Їх тривимірність створює відчуття глибини та об'єму, що робить їх більш захоплюючими та інформативними.

Інтерактивність: голографічні монітори можуть бути інтерактивними, що дозволяє користувачам взаємодіяти з зображеннями та маніпулювати ними. Це може бути корисно для таких завдань, як віртуальне навчання, хірургія та ігри.

Відображення інформації: голографічні монітори можуть відображати значно більше інформації, ніж традиційні дисплеї. Це пов'язано з тим, що вони можуть проектувати зображення в трьох вимірах, а не лише на двовимірній поверхні.

Нові можливості: голографічні монітори відкривають нові можливості для спілкування, розваг та освіти. Вони можуть використовуватися для створення віртуальних середовищ, які неможливо відтворити за допомогою традиційних дисплеїв.

Враховуючи основні переваги голографічних моніторів можна виокремити декілька основних сфер їх використання.

Освіта: голографічні монітори можуть використовуватися для створення більш захоплюючого та інтерактивного досвіду навчання. Вони можуть дозволити учням візуалізувати складні концепції та взаємодіяти з ними, що може призвести до кращого засвоєння матеріалу.

Медицина: голографічні монітори можуть використовуватися для візуалізації анатомії та проведення хірургічних операцій. Це може допомогти хірургам краще планувати та виконувати операції, що може призвести до кращих результатів для пацієнтів.

Розваги: голографічні монітори можуть використовуватися для створення більш реалістичного досвіду ігор і фільмів. Вони також можуть використовуватися для створення віртуальних концертів та інших заходів.

Реклама: голографічні монітори можуть використовуватися для створення більш привабливих рекламних дисплеїв. Вони можуть дозволити рекламодавцям розповідати історії та демонструвати продукти більш захоплюючим способом.

Голографічні монітори є перспективним напрямком в сучасних технологіях візуалізації і відображення інформації. Їх принцип роботи базується на використанні світлової інтерференції та дифракції для створення тривимірних зображень без необхідності у спеціальних окулярах чи гарнітурах. Основні фізичні властивості, такі як дифракція світла і інтерференція, лежать в основі їхньої роботи.

Перспективи використання голографічних моніторів дуже широкі. Вони можуть знайти застосування в медицині для відображення тривимірних моделей органів та тканин, у навчанні для візуалізації складних концепцій, у розважальній індустрії для створення іммерсивних віртуальних середовищ, у телекомунікаціях для покращення спілкування та багато іншого.

Голографічні монітори можуть змінити спосіб, яким ми сприймаємо і взаємодіємо з інформацією, роблячи візуалізацію більш іммерсивною, ефективною та інтерактивною. Хоча вони ще не стали повсякденними в нашому житті, їхні потенційні можливості надають підстави для оптимізму щодо майбутнього розвитку цієї технології.

УДК 621.389

КВАНТОВІ ОБЧИСЛЕННЯ Ю. Серьогін, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

Квантові обчислення – це нова, швидко розвивається галузь, яка поєднує принципи квантової механіки з інформатикою. На відміну від класичних комп'ютерів, які оперують з бітами, що можуть бути лише в стані 0 або 1, квантові комп'ютери використовують кубіти. Кубіти – це одиниці інформації, які можуть бути в суперпозиції 0 і 1 одночасно. Ця унікальна властивість, а також інші квантові явища, такі як заплутаність, дають квантовим комп'ютерам потенціал для вирішення задач, які є неможливими або занадто складними для класичних комп'ютерів.

Основні принципи квантових обчислень. Квантові біти (кубіти) – одиниця інформації в квантовому комп'ютері, яка може бути в суперпозиції 0 і 1 одночасно. Квантові ворота – операції, які виконуються над кубітами, щоб змінити їх стан. Квантова заплутаність – феномен, коли два або більше кубітів пов'язані між собою таким чином, що зміна стану одного кубіта миттєво впливає на стан інших.

Переваги квантових обчислень. Експоненційне прискорення – квантові комп'ютери можуть вирішувати деякі задачі значно швидше, ніж класичні комп'ютери. Це робить їх перспективними для розв'язання задач, які потребують великих обчислювальних ресурсів, таких як моделювання складних систем, криптографія та машинне навчання. Можливість вирішення нових задач – квантові комп'ютери можуть вирішувати задачі, які є неможливими або занадто складними для класичних комп'ютерів. Це відкриває нові можливості для досліджень в таких галузях, як розробка нових матеріалів, медицина та штучний інтелект. Нові алгоритми та програми – квантові обчислення відкривають нові можливості для розробки алгоритмів і програм, які неможливі на класичних комп'ютерах. Це може призвести до революційних змін в таких галузях, як штучний інтелект, оптимізація та машинне навчання.

Застосування квантових обчислень. Криптографія – квантові комп'ютери можуть зламати багато сучасних криптографічних алгоритмів, що робить їх важливим для кібербезпеки. Розробка нових матеріалів – квантові обчислення можуть допомогти в розробці нових матеріалів з покращеними властивостями, таких як міцність, провідність та каталітична активність. Медицина та фармацевтика – квантові обчислення можуть допомогти в розробці нових ліків та методів лікування, а також в персоналізації медицини. Штучний інтелект – квантові обчислення можуть допомогти в розробці нових алгоритмів штучного інтелекту, які є більш потужними та ефективними.

Квантові комп'ютери: майбутнє, яке змінить все! Уявіть собі комп'ютери, які можуть вирішувати задачі, що зараз неможливі, лікувати невиліковні хвороби та створювати нові, дивовижні матеріали. Це не фантастика, а реальність, яка може стати доступною завдяки квантовим обчисленням! На відміну від звичайних комп'ютерів, які працюють з бітами (0 або 1), квантові комп'ютери використовують кубіти, які можуть бути одночасно 0 і 1. Це дає їм неймовірну потужність, адже вони можуть виконувати мільйони обчислень за лічені секунди!

Ось лише декілька можливих застосувань квантових комп'ютерів. Розробка нових ліків та методів лікування – квантові комп'ютери допоможуть нам краще зрозуміти будову молекул та розробити нові, більш ефективні ліки та вакцини. Створення нових матеріалів – з їх допомогою можна буде створювати надміцні, легкі та гнучкі матеріали, яких ще не існує. Захист даних – квантові комп'ютери також можуть використовуватися для розробки нових, більш стійких до злому методів шифрування.

Однак, наразі квантові обчислення все ще перебувають на ранній стадії розвитку. Існує багато проблем, які потрібно вирішити, перш ніж квантові комп'ютери стануть доступними

для широкого загалу. Що ж ми можемо зробити, щоб прискорити розвиток квантових обчислень? Підтримувати дослідження – важливо інвестувати в дослідження квантових обчислень, щоб допомогти вченим подолати технічні проблеми. Підвищувати обізнаність – люди повинні знати про потенціал квантових обчислень, щоб підтримувати їх розвиток. Навчати нове покоління – нам потрібні кваліфіковані фахівці, які зможуть працювати з квантовими комп'ютерами.

Створені реально квантові комп'ютери досі оперували з дуже незначною кількістю кубітів. 2007 року оголошене створення квантового комп'ютера із 16 кубітами [1]. У листопаді 2017 року компанія IBM представила прототип квантового комп'ютера з 50 кубіт. У представленому прототипі час когерентності кубіт (час, протягом якого вони можуть залишатись у стані суперпозиції та виконувати корисні обчислення) вдалось збільшити до 90 мікросекунд [2]. Основна частина цього прототипу (його «ядро») компанія показала на виставці CES 2018 [3]. У січні 2018 року на виставці CES 2018 компанія Intel представила чип квантового комп'ютера на 49 кубіт з назвою Tangle Lake. У процесорі використані надпровідні ланцюги, робоча температура яких дорівнює 20 мілікельвін [4]. У червні 2024 року, в дослідженні, опублікованому на платформі arXiv, було зазначено, що квантовий комп'ютер H2-1 компанії Quantinuum продемонстрував нові можливості квантових обчислень, перевищивши результати Google у 100 разів [5]. У вересні 2024 року компанія Microsoft оголосила про партнерство з Atom Computing для створення найпотужнішого у світі квантового суперкомп'ютера. Нова система стане кроком у розвитку обчислювальної платформи Azure Quantum і буде доступною для комерційного використання. Новий квантовий комп'ютер інтегруватиме систему квантових обчислень на нейтральних атомах Atom Computing в екосистему віртуалізації кубітів Microsoft Azure Quantum.

Майбутнє квантових обчислень сповнене можливостей. З їх допомогою ми можемо вирішити багато проблем, які здаються непереборними, та зробити світ кращим. Квантові обчислення – це нова та перспективна галузь, яка має потенціал революціонізувати багато сфер життя. Хоча квантові комп'ютери все ще знаходяться на ранній стадії розвитку, дослідження в цій галузі активно проводяться у всьому світі. Існує багато технічних проблем, які необхідно вирішити, перш ніж квантові комп'ютери стануть широко доступними. Однак потенціал квантових обчислень настільки великий, що інвестиції в цю галузь є виправданими.

1. Продемонстровано перший комерційний квантовий комп'ютер.
<http://www.osvita.org.ua/news/26153.html>

2. Samuel K. Moore. IBM Edges Closer to Quantum Supremacy with 50-Qubit Processor. *IEEE Spectrum*. <https://spectrum.ieee.org/tech-talk/computing/hardware/ibm-edges-closer-to-quantum-supremacy-with-50qubit-processor>

3. Скрипин В. Вот так выглядит 50-кубитный квантовый компьютер IBM.
<https://itc.ua/blogs/vot-tak-vyiglyadit-50-kubitnyi-y-kvantovyyi-kompyuter-ibm/>

4. Jeremy Hsu. CES 2018: Intel's 49-Qubit Chip Shoots for Quantum Supremacy. *IEEE Spectrum*. <https://spectrum.ieee.org/tech-talk/computing/hardware/intels-49qubit-chip-aims-for-quantum-supremacy>

5. Курапов Д. Квантовый комп'ютер від Quantinuum продемонстрував нові можливості квантових обчислень, перевищивши результати Google у 100 разів.
<https://itnet.com.ua/uk/kvantovyyi-kompyuter-ot-quantinuum-prodemonstriroval-novye-vozmozhnosti-kvantovyyx-vychislenij-prevysiv-rezultaty-google-v-100-raz/>

УДК 539.2

ЗАСТОСУВАННЯ НАНОТЕХНОЛОГІЙ В ЕНЕРГЕТИЦІ: ПЕРЕВАГИ, ВИКЛИКИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ

Б. Троць , С.А. Федосов , Д.А. Захарчук

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, fedosov.serhiy@gmail.com*

Нанотехнології є однією з найбільш інноваційних галузей науки і технології, що вивчає і застосовує матеріали та структури на рівні нанометрів. Вони відрізняються від традиційних матеріалів своїми унікальними властивостями, такими як велика площа поверхні, висока реактивність і покращені фізичні, хімічні та електронні властивості. У сфері енергетики нанотехнології мають великий потенціал для розвитку інноваційних рішень, спрямованих на вирішення важливих енергетичних викликів сучасності.

Одним із напрямків використання нанотехнологій в енергетиці є розробка нових типів сонячних батарей. Використання наночастинок у сонячних панелях може покращити їхню ефективність і знизити вартість виробництва, що робить сонячну енергію більш доступною та ефективною. Інший важливий аспект – це використання нанотехнологій у розробці нових матеріалів для виробництва паливних елементів. Наноматеріали можуть покращити каталітичні властивості паливних елементів, забезпечуючи більшу ефективність конвертації енергії та знижуючи витрати на їх виробництво. Крім того, нанотехнології використовуються у розробці нових систем зберігання та передачі енергії. Наприклад, наноматеріали можуть бути використані для створення нових типів батарей з великою ємністю і швидкістю заряджання, а також для розробки ефективних систем зберігання енергії, таких як нанотехнології на основі літєвих акумуляторів.

У світлі зростаючого інтересу до використання альтернативних джерел енергії та розвитку сталих енергетичних систем, нанотехнології можуть стати ключовим інструментом у досягненні цих цілей. Вони відкривають нові можливості для покращення ефективності, надійності та стійкості енергетичних систем, що сприяє переходу до більш сталого та екологічно чистого енергетичного майбутнього.

Нанотехнології в енергетиці відкривають широкі можливості для покращення ефективності, стійкості та сталості енергетичних систем. Зосередимо увагу на трьох основних напрямках застосування нанотехнологій в енергетиці: виробництво сонячних батарей на основі наночастинок, використання наноматеріалів у виробництві паливних елементів і розвиток наноенергетичних систем для зберігання та передачі енергії. Сонячна енергія вважається одним із найбільш перспективних джерел альтернативної енергії, але поточні сонячні батареї мають обмежену ефективність. Застосування нанотехнологій дозволяє покращити ефективність сонячних панелей шляхом використання наночастинок. Наночастинки можуть мати унікальні фізичні властивості, такі як підвищена поглинання світла та підвищена ефективність перетворення світлової енергії на електричну. Використання наночастинок дозволяє збільшити ефективність сонячних батарей та знизити витрати на виробництво. Паливні елементи – це енергетичні пристрої, що використовують хімічні реакції для виробництва електричної енергії. Застосування наноматеріалів у паливних елементах може покращити їх ефективність та стійкість. Наприклад, наноматеріали можуть використовуватися як каталізатори для прискорення хімічних реакцій у паливних елементах, що дозволяє збільшити електричний вихід та знизити витрати палива. Нанотехнології також використовуються у розробці нових систем зберігання та передачі енергії. Наприклад, наноматеріали можуть використовуватися у батареях з високою ємністю та швидкістю заряджання, що дозволяє зберігати більше енергії та забезпечити швидке заряджання. Крім того, наноматеріали можуть бути використані у суперконденсаторах та інших енергоємних

пристроях для забезпечення стабільного та ефективного зберігання енергії. Загальний вплив застосування нанотехнологій в енергетиці полягає в покращенні ефективності та екологічної сталості енергетичних систем, що сприяє створенню більш сталого та ефективного енергетичного майбутнього.

Переваги використання нанотехнологій в енергетиці пов'язані з підвищенням ефективності енергетичних систем, зменшенням втрат енергії під час транспортування та зберігання і створенням нових можливостей для розвитку альтернативних джерел енергії. Нанотехнології дозволяють створювати нові матеріали з унікальними властивостями, що можуть значно покращити ефективність енергетичних систем. Наприклад, використання наночастинок у сонячних батареях може збільшити їхню поглинання світла та підвищити конверсійну ефективність, що призведе до збільшення виробленої електроенергії. Також, застосування наноматеріалів у паливних елементах може підвищити їхню ефективність та знизити витрати палива, що є важливим для розвитку енергоефективних технологій. Нанотехнології також можуть бути використані для створення нових матеріалів та систем для зберігання та транспортування енергії з меншими втратами. Наприклад, розробка наноматеріалів для виробництва батарей з високою ємністю та швидкістю заряджання може допомогти зменшити втрати енергії під час зберігання та транспортування електроенергії. Також, застосування наноматеріалів у провідниках може знизити опір та теплові втрати під час передачі електроенергії по мережі. Нанотехнології відкривають нові можливості для розвитку альтернативних джерел енергії та зменшення залежності від вугільних та нафтових ресурсів. Вони можуть бути використані для покращення ефективності та стабільності сонячних, вітрових та гідроенергетичних установок, а також для розвитку нових технологій, таких як паливні елементи на основі водню. Це важливий крок у напрямку розвитку сталої та екологічно чистої енергетики. Таким чином, використання нанотехнологій в енергетиці може призвести до значного покращення ефективності, стійкості та екологічної сталості енергетичних систем, що сприяє розвитку сталого та ефективного енергетичного майбутнього.

Наноматеріали мають унікальні фізичні та хімічні властивості, але разом з цим існують певні ризики для здоров'я та навколишнього середовища. Наприклад, деякі наночастинки можуть бути токсичними при великих концентраціях або при потраплянні в організм людини через дихання чи шкіру. Також, існує ризик наноматеріалів розсіюватися в природному середовищі та впливати на екосистеми. Виробництво наноматеріалів може включати в себе використання різноманітних хімічних речовин та енергетичних ресурсів, що може мати негативний вплив на довкілля. Також, під час використання нанотехнологій у енергетиці необхідно враховувати можливість викидів наноматеріалів під час експлуатації та утилізації енергетичних систем. Впровадження нанотехнологій в енергетиці вимагає розробки та впровадження ефективних регулятивних механізмів, які забезпечать безпеку та сталість використання цих технологій. Необхідно розробляти стандарти та нормативи для оцінки безпеки наноматеріалів, а також визначити правила виробництва, транспортування та використання наноматеріалів у енергетичних системах. Вирішення цих викликів вимагає співпраці між науковими установами, промисловими компаніями, урядовими органами та громадськістю. Важливо забезпечити збалансований підхід до впровадження нанотехнологій в енергетику, що враховує як їхні потенціальні переваги, так і можливі ризики для здоров'я та довкілля.

Застосування нанотехнологій у сфері енергетики відкриває широкі можливості для покращення ефективності, стійкості та екологічної чистоти енергетичних систем. Проте, разом з потенційними перевагами, використання нанотехнологій також вносить певні виклики та ризики, пов'язані з безпекою, екологією та регулятивними аспектами. Використання нанотехнологій має великий потенціал для трансформації енергетичної індустрії та створення більш сталої та ефективної енергетики, за умови врахування та вирішення всіх викликів та ризиків, пов'язаних з цим процесом.

Секція 4. Теоретичні та прикладні питання математичної фізики

UDC 517.9

MATHEMATICAL RESEARCH OF THE DYNAMICS OF THE ELECTRICAL POTENTIAL OF A NEURON

H.M. Hubal

Lutsk National Technical University, 75 Lvivska st., Lutsk 43018, Ukraine,

halynahbl@gmail.com

A nerve cell (neuron) is a structural and functional unit of the nervous system.

There is a close relationship between the structural parts of a neuron and their functional purpose [1], [2]. Regarding the structural characteristics of the nerve cell, we have information about the shape and size of the cell soma, the length of the axon, the type of dendrites, the structure, shape and size of synapses, the thickness of the nerve membrane and its internal structure. The functional characteristics of a nerve cell are primarily its systemic function - action potential, presence of two types of synapses - excitatory and inhibitory, resting potential, excitation threshold, presence of concentration gradients of the main potential-forming ions.

The final result of nerve cell activity – the generation of an action potential – is provided by various mechanisms.

This is primarily the primary transformation of action potentials arriving at the presynaptic membrane into the release of a chemical mediator (for synapses with chemical transmission), which activates the postsynaptic membrane. Then there is a postsynaptic potential (excitatory or inhibitory depending on the type of synapse), which spreads along the cell body and sums up with other postsynaptic potentials in the axon tubercle. If the total postsynaptic potential exceeds the threshold of the nerve cell, an action potential occurs. When postsynaptic potentials pass through the cell membrane, they can interact with each other according to fairly complex laws. Thus, it is known that the interaction of excitatory postsynaptic potentials and inhibitory postsynaptic potentials depends on the phase (increase or decrease of postsynaptic potentials). The total postsynaptic potential of the axon hillock reflects all the random processes to which the primary action potentials that arrived at the presynaptic membrane undergo.

Thus, the system function of a nerve cell corresponds to the complexity and organization of the environment and is built on intermediate transformations in the process of spreading the postsynaptic potential throughout the cell body; and different mechanisms of electrical excitation in different areas of the nerve cell reflect certain features and functioning of these areas. It should be noted that for a correct understanding of phenomena of the summation of all synaptic processes and the assessment of the role of the synaptic membrane, we must first analyze the nature of postsynaptic effects at the level of individual synapses: excitatory and inhibitory.

The rate of change in the concentration of excitatory ions is proportional to the potential of external irritation (V) and is lower, the higher the concentration (c) of these ions is. Formally, we write this in the form of the differential equation where k_1 and k_2 are constants.

External irritation affects the rate of change in the concentration of excitatory and inhibitory ions. Then we can write the system of two differential equations where c_1 and c_2 are concentrations of excitatory and inhibitory ions, respectively; k_1 and k_2 are constants.

Taking into account that external irritation affects the change in the concentration of excitatory ions, and the change in their concentration affects the change in the concentration of inhibitory ions.

Thus, external irritation affects inhibitory ions not directly, but through the system of excitatory ions. Sequence of influence leads to such a system of differential equations: where V is nerve cell membrane potential.

The application of differential equations to describe the change in the electrical potential of a nerve cell in response to electrical stimulation makes it possible to describe the process of passive

(electrotonic) change in potential from the moment of stimulation to the moment of the occurrence of an active reaction – the action potential.

1. Amosov, N.M., et al. Theoretical research of physiological systems. Kyiv, Ukraine: Naukova Dumka, 1977.
2. Iwata, Ryohei, et. al. Mitochondria metabolism sets the species-specific tempo of neuronal development. *Science*, 2023, 379.6632: eabn4705.

УДК: 538.9

FIRST-PRINCIPLE CALCULATION OF THE STRUCTURE STABILITY OF 2D CDTE CLUSTERS

E. Vysochanska, H. Ilchuk, A. Kashuba, I. Semkiv

Department of General Physics, Lviv Polytechnic National University,
12 Bandera Str., 79013 Lviv, Ukraine
e-mail: andrii.i.kashuba@lpnu.ua

The results of the studies of the low-dimensional (ring and linear) structures of the CdTe are analyzed. These results can help to understand the growth behavior of the stable CdTe clusters in linear or ring structures. This work is focused on establishing the energy properties and stability factors of Cd_nTe_n clusters ($n < 10$) as a function of the size. Also, we note that for such types of calculations the GGA+PBE approximation with Hubbard corrections (GGA+ U) was used. Note that all the above characteristics are important for optimizing the materials for photovoltaic engineering.

All calculations including geometry optimization and energy spectra were performed using DFT, which was implemented in the Quantum-Espresso package [1]. The generalized gradient approximation GGA+PBE was used to describe the exchange-correlation energy of the electronic subsystem with Hubbard corrections (GGA+ U). Firstly, structure optimization and calculation of electron band energy structure were made for bulk CdTe. This calculation was performed to estimate the value of Hubbard corrections. The value $E_{\text{cut-off}} = 660$ eV for the energy of cutting-off the plane waves was used in our calculations. The electronic configurations of $5s^24d^{10}$ for Cd and $5s^25p^4$ for Te atoms formed the valence electronic states. The self-consistent convergence of the total energy was taken as 5.0×10^{-6} eV/atom. Geometry optimization of the lattice parameters and atomic coordinates was performed using the Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) minimization technique with the maximum ionic Hellmann–Feynman forces within 0.01 eV/Å, the maximum ionic displacement within 5.0×10^{-4} Å, and the maximum stress within 0.02 GPa.

The convergence criteria for energy and force were set to $\sim 3 \times 10^{-4}$ eV and $\sim 5 \times 10^{-2}$ eV/Å respectively for all the calculations. To accurately describe the electronic spectrum, two Hubbard corrections were selected for the studied objects: for d -orbitals Cd ($U_{4d} = 5.80$ eV) and p -orbitals Te ($U_{5p} = 2.55$ eV) [2].

To estimate the stability of the studied clusters, the binding energy was calculated. The binding energies of Cd_nTe_n clusters for $n = 1–10$ obtained using Eq. (1)) are shown in Fig. 1. The binding energy of CdTe clusters with linear structure increases with cluster size increasing. This is connected with the increasing stability of the linear-structure CdTe clusters. The maximum value of the binding energy was obtained for CdTe cluster with ring structure when $n = 5$.

$$E_b = [n \cdot E_{\text{total}}(\text{Cd}) + n \cdot E_{\text{total}}(\text{Te}) - E_{\text{total}}(\text{Cd}_n\text{Te}_n)] / n \quad (1)$$

where, $E_{\text{total}}(\text{Cd})$ is the energy of the cadmium atom, $E_{\text{total}}(\text{Te})$ is the energy of tellurium atom and n is the number of atoms in the cluster.

Another property used as an indicator of the stability of geometrically optimized CdTe clusters is the relative stability (stability factor, SF), which can be calculated by the use of the Eq. (2).

$$SF = [E(\text{Cd}_{n-1}\text{Te}_{n-1}) + E(\text{Cd}_{n+1}\text{Te}_{n+1}) - 2E(\text{Cd}_n\text{Te}_n)] \quad (2)$$

Fig. 2 shows the dependence of calculated relative stability for the linear and ring structures of the CdTe on cluster size. One can notice that the most favorable CdTe cluster sizes are $n = 6$ and 9 . The ring-type structures of the CdTe clusters with $n = 3$ and 5 are found to be most favorable.

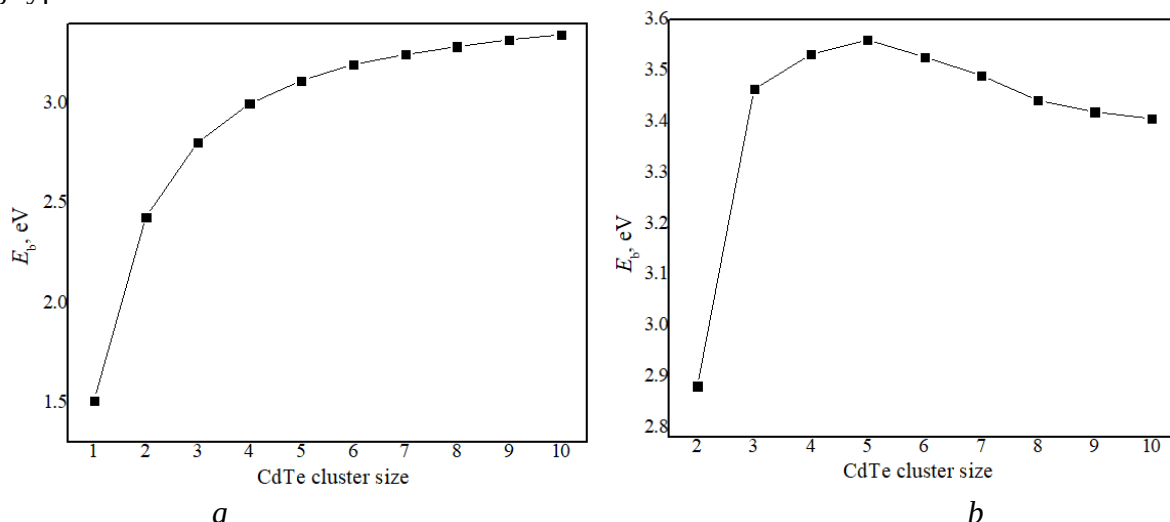


Fig. 1. Binding energy per CdTe molecule for the CdTe clusters with linear (a) and ring (b) structures.

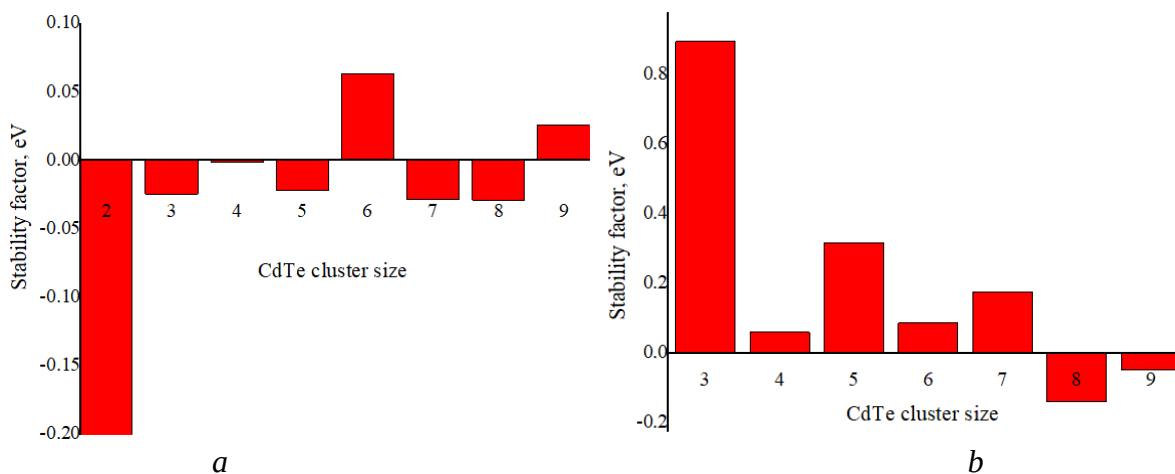


Fig. 2. Variation of stability with cluster size for the CdTe clusters with linear (a) and ring (b) structure.

The first-principle theoretical studies of the structure and electronic properties of the Cd_nTe_n ($n \leq 10$) clusters with linear and ring structures have been carried out using the reliable techniques of density functional theory and known approximations. Based on these calculations, the energy position of binding energy, and stability factor are obtained for the studied clusters. The stability of CdTe clusters with the linear structure increases with cluster size increasing. The most favorable linear-structure CdTe cluster sizes are $n = 6$ and 9 . If comparing linear and ring structures, the more favorable structures are

ring-type ones. The highest relative stability of CdTe clusters with ring structure has corresponded to cases $n = 3$ and 5 [2].

1. Giannozzi, P.; Andreussi, O.; Brumme, T.; Bunau, O.; Buongiorno Nardelli, M.; Calandra, M.; Car, R.; Cavazzoni, C.; Ceresoli, D.; Cococcioni, M. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys.: Condens. Matter.* **2017**, 29, 465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79
2. Kashuba, A.; Semkiv, I.; Rudysh, M.; Ilchuk, H.; Shchepanskyi, P. Ring and Linear Structures of CdTe Clusters. *Quantum Rep.* **2024**, 6, 349-358. <https://doi.org/10.3390/quantum6030022>

УДК 538.915; 621.315.592

**РОЗРАХУНОК СПІВВІДНОШЕНЬ ВЕЛИЧИН ФОТОІНДУКОВАНОЇ АНІЗОТРОПІЇ
У СМУГАХ ПОГЛИНАННЯ МА-ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ НА СКОЛАХ
КРИСТАЛІВ $\text{SrCl}_2\text{-Me}^+$
А. Кульчицький, О. Семотюк**

Національний університет «Львівська політехніка»

МА-центри забарвлення кристалів $\text{SrCl}_2\text{-Me}^+$ мають смуги поглинання в областях: 2,80 eV, 2,32 eV, 1,64 eV, обумовлені дипольними оптичними переходами α , β , γ , відповідно. Причому довгохвильова смуга поглинання оптично неактивна. Тобто, при підсвітці у спектральній області 1,64 eV кристал не змінює поглинання, і оптична анізотропія (у лінійно поляризованому світлі) не наводиться. При дії висвічуючим лінійно поляризованим світлом в інших смугах (2,80 eV, або 2,32 eV), при певних умовах, оптична анізотропія може наводитись в усіх трьох смугах поглинання. Такий зв'язок вивчався нами (як експериментально, так і теоретично) у попередніх роботах, в яких досліджувались монокристалічні зразки з площиною (001), на яку виходили методом поліровки. При цьому втрачалась більша частина зразка, вирощеного методом Стокбаргера. Сам же монокристал хлориду стронцію легко сколювати по площинам (111). Таких зразків можна отримати (з однакової кількості сировини) на порядок більше, ніж зразків з площиною (001). Тому, виникла необхідність проведення теоретичних розрахунків взаємозв'язків фотоіндукованої оптичної анізотропії у смугах поглинання МА-центрів забарвлення кристалів $\text{SrCl}_2\text{-Me}^+$ на сколах по площинам (111). При проведенні відповідних розрахунків була використана дипольна модель МА-центрів, яка розглядалась у попередніх роботах. Нижче наведені результати розрахунків.

Якщо $E_{\text{висв}} \parallel [110]$ діє на α - диполі, то при наведенні анізотропії в короткохвильовій λ_α смузі поглинання, в більш довгохвильових смугах λ_β , λ_γ повинні виникати анізотропні параметри у співвідношеннях:

$${}_1A_\alpha^\alpha: {}_1A_\beta^\alpha: {}_1A_\gamma^\alpha = -1:3:-2.$$

Якщо $E_{\text{висв}} \parallel [112]$ діє на α - диполі, то виникає анізотропія у співвідношеннях:

$${}_2A_\alpha^\alpha: {}_2A_\beta^\alpha: {}_2A_\gamma^\alpha = -3:1:2.$$

Якщо $E_{\text{висв}} \parallel [110]$ діє на β - диполі, то також виникає анізотропія як в короткохвильовій смузі поглинання, так і в довгохвильовій смузі поглинання у співвідношеннях:

$${}_1A_\alpha^\beta: {}_1A_\beta^\beta: {}_1A_\gamma^\beta = 3:-1:-2.$$

Якщо $E_{\text{висв}} \parallel [112]$ діє на β - диполі, то також виникає анізотропія як у короткохвильовій смугі поглинання, так і в довгохвильовій смугі поглинання:

$${}_2A_{\alpha}^{\beta}: {}_2A_{\beta}^{\beta}: {}_2A_{\gamma}^{\beta} = 1: -3: 2.$$

Використовуючи вище зроблені розрахунки, можна проводити експериментальні дослідження в лінійно поляризованому світлі на зразках, отриманих сколюванням, а не поліровкою.

УДК 621.315.592

СПІВВІДНОШЕННЯ ВЗАЄМНОСТІ В ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ КОМПОЗИТАХ: ТРИВИМІРНИЙ ВИПАДОК

О.А. Снарський, І.М. Іванова, В.В. Федотов

*Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського", Берестейський проспект, 37, Київ, 03056, Україна
e-mail: asnarskii@gmail.com*

Задача обчислення властивостей композитів, зокрема обчислення ефективних кінетичних коефіцієнтів (ЕКК), являє собою складну задачу. Точний розв'язок задачі по обчисленню ЕКК термоелектричних середовищ у всій області концентрацій фаз з різними значеннями локальних кінетичних коефіцієнтів не має загального точного розв'язку. Існують різні наближення, що дозволяють в ряді випадків отримувати відносно точні концентраційні вирази для ЕКК. [1-5] Але в цілому, у всій області концентрацій можливий лише наближений опис, найчастіше використовується вдале наближення середнього поля [6,4].

В деяких випадках вдається отримати додаткові вирази для ЕКК, наприклад, для двовимірного випадково неоднорідного середовища для задачі провідності було отримано так зване співвідношення взаємності [7].

Розглянемо співвідношення взаємності в тривимірних термоелектричних композитах зі зсунутим порогом протікання. Слід підкреслити, що питання співвідношень взаємності розглядається в рамках наближеної теорії –модифіковане наближення ефективного середнього поля.

Розглянемо однопотокову задачу, в якій введемо нормоване співвідношення для -
 $\sigma_e(p)\sigma_e(1-p)$

$$\Lambda\sigma(p, \tilde{p}_c) = \frac{\sigma_e(p)\sigma_e(1-p)}{[\sigma_e(p_c = \tilde{p}_c)]^2}, \quad (1)$$

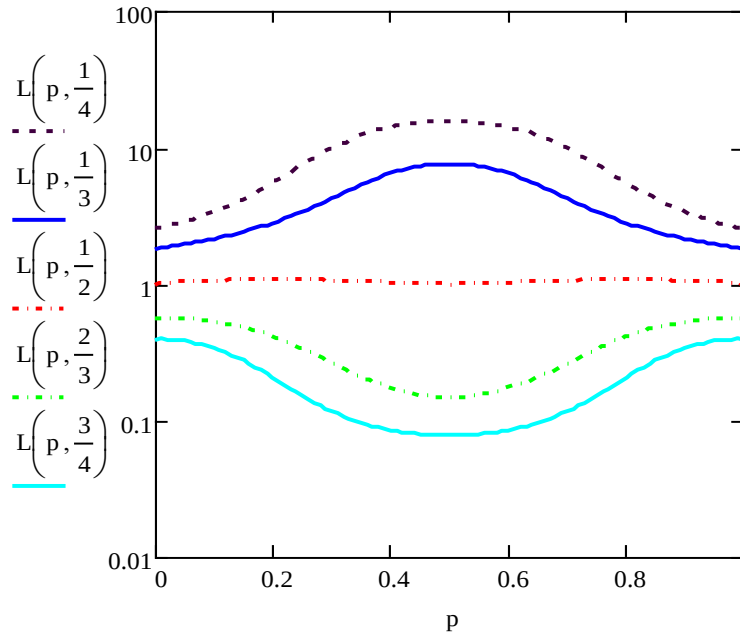


Рис.1 Концентраційна залежність $\Lambda\sigma(p)$ в залежності відобраного порогу протікання, тривимірний випадок за відсутності теормоелектричних явищ. Значення концентрацій порогу протікання $\tilde{p}_c = 1/4, 1/3, 1/2, 2/3, 3/4$ згори вниз.

де $\tilde{p}_c$ - заданий поріг протікання при описі концентраційної залежності коефіцієнту ефективної провідності $\sigma_e(p)$ в рамках модифікованої теорії середнього поля, коли ефективна провідність залежить від заданого порогу протікання. Природньо, при заданні $\tilde{p}_c = 1/3$ модифікована теорія середнього поля переходить у свій стандартний вид

$$\frac{\sigma_e - \sigma_1}{(d-1)\sigma_e + \sigma_1} p + \frac{\sigma_e - \sigma_2}{(d-1)\sigma_e + \sigma_2} (1-p) = 0 \quad (2)$$

де $d = 2, 3$

Відмітимо, що значення ефективної провідності при будь-якому значенні концентрації (навіть далеко від порогу протікання) залежить і від значення заданого $\tilde{p}_c$.

На рисунку 2 показано концентраційну поведінку $\Lambda\sigma(p)$, і видно, що $\Lambda\sigma(p)$ тим ближчий до константи чим ближчий задаваємий поріг протікання до значення $1/2$.

Розглянуті тривимірні випадкові середовища (композити) з різними порогами протікання. При дослідженні співвідношень взаємності для однофазового випадку (провідність) доводить звертатись до модифікації стандартного методу обчислення ЕКК, що дозволяє розглядати середовища з різним наперед заданим порогом протікання. В межах модифікованої теорії середнього поля показано існування співвідношень взаємності для явищ в середовищах поблизу порогу протікання $1/2$.

1. Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties, Springer Verlag: New York, USA, 2002. doi: 10.1115/1.1483342
2. Balagurov B. Ya. Electrophysical Properties in composites. Leland 2015, 752 p.
3. Andrianov I.V., Awrejcewicz J., Danishevskyy V.V., Asymptotical Mechanics of Composites, Springer: Cham, Germany, 2018, 313. doi: 10.1007/978-3-319-65786-8
4. Choy T.C., Effective medium theory: principles and applications, Oxford University Press: Oxford, UK, 2016. doi:10.1093/acprof:oso/9780198705093.001.0001
5. Snarskii A., Bezsudnov I.V., Sevryukov V.A., Morozovskiy A., Malinsky J., Transport Processes in Macroscopically Disordered Media. From Mean Field Theory to Percolation, Springer Verlag: New York, USA, 2016. doi: 10.1007/978-1-4419-8291-9.

6. Bruggeman V.D., Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen. Ann. Phys. (Leipzig), 1935, 416, 664. doi: 10.1002/andp.19354160705

7. Landauer R., The electrical resistance of binary metallic mixtures. J. Appl. Phys. 1952, 23, 784. doi:10.1063/1.1702301.

УДК 534.1

СТІЙКІСТЬ РОЗВ'ЯЗКІВ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ ПРИ СИНХРОНІЗАЦІЇ ВІБРОЗБУДНИКІВ У ВІБРАЦІЙНИХ МАШИНАХ

Тимошук В.М., Гуда О.В., Потейчук М.І.

Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, e-mail: victortymoshchuk@lutsk-ntu.com.ua

Розглядається двократна динамічна синхронізація трьох дебалансних віброзбудників, тобто випадок, коли один збудник обертається з кутовою швидкістю вдвічі більшою, ніж інші. Нехай дебалансні віброзбудники, симетрично розміщені на тримкому твердому тілі, яке може здійснювати малі плоскопаралельні коливання; площина осей обертання всіх віброзбудників проходить через центр мас тримкового тіла; центральний віброзбудник розміщений в центрі мас тіла (рис. 1). Усі віброзбудники приводяться в рух від незалежних асинхронних електродвигунів, обертаються в однакових напрямках, при цьому синхронна частота обертання двигуна центрального віброзбудника в два рази більша за синхронну частоту крайніх збудників. Тримке тіло зв'язане з нерухомою основою за допомогою пружних елементів.

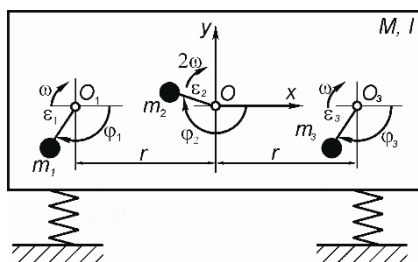


Рис. 1. Вібраційна машина з трьома дебалансними збудниками симетрично розміщені на тримкому тілі

Диференціальні рівняння руху такої коливальної системи з 3+3 ступенями вільності можуть бути подані у вигляді

$$\begin{cases} I_i \ddot{\varphi}_i = L_i(\dot{\varphi}_i) - R_i(\dot{\varphi}_i) + \Phi_i(\varphi_i, \ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{\varphi}, t), \\ M\ddot{x} + c_x x = \sum_{i=1}^3 m_i \varepsilon_i (\ddot{\varphi}_i \sin \varphi_i + \dot{\varphi}_i^2 \cos \varphi_i), \\ M\ddot{y} + c_y y = \sum_{i=1}^3 m_i \varepsilon_i (\ddot{\varphi}_i \cos \varphi_i - \dot{\varphi}_i^2 \sin \varphi_i), \end{cases} \quad (1)$$

$$I\ddot{\varphi} + c_\varphi \varphi = \sum_{i=1}^3 m_i \varepsilon_i r_i (\dot{\varphi}_i^2 \sin(\varphi_i + \delta_i) - \ddot{\varphi}_i \cos(\varphi_i + \delta_i)), \quad i=1, 2, 3, \quad (2)$$

де $\Phi_i(\varphi_i, \ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{\varphi}, t) = m_i \varepsilon_i (\ddot{x} \sin \varphi_i + \ddot{y} \cos \varphi_i - r_i \ddot{\varphi} \cos(\varphi_i + \delta_i) + g \cos \varphi_i)$; x, y, φ – узагальнені координати, що визначають положення тримкового тіла; φ_i – кут повороту ротора i -го віброзбудника; I – момент інерції пружнопідвішеного тримкового тіла відносно осі, що проходить через його центр

мас; I_i – момент інерції i -го ротора віброзбуджувача відносно осі обертання; r_i, δ_i – полярні координати осі i -го віброзбудника (поліус O , полярна вісь Ox).

Після нескладних перетворень одержимо диференціальні рівняння синхронних рухів роторів віброзбудників

$$\begin{cases} I_1 \ddot{\alpha}_1 + k_1 \dot{\alpha}_1 = L_1(\omega) - R_1(\omega) + V_1, \\ I_2 \ddot{\alpha}_2 + k_2 \dot{\alpha}_2 = L_2(2\omega) - R_2(2\omega) + V_2, \\ I_3 \ddot{\alpha}_3 + k_3 \dot{\alpha}_3 = L_3(\omega) - R_3(\omega) + V_3, \end{cases} \quad (3)$$

де $V_1 = v_{13} + v_{12}$, $V_2 = v_{21} + v_{23}$, $V_3 = v_{31} + v_{32}$.

Прирівнюючи до нуля праві частини рівнянь (3) одержимо систему рівнянь для визначення різниці фаз і частоти ω в можливих кратно-синхронних рухах роторів віброзбудників. При цьому достатньо обмежитися початковим наближенням цих величин. Наявність у рівнянь (3) розв'язків, у яких $\alpha_1 - \alpha_2$, $\alpha_1 - \alpha_3$, $\alpha_2 - \alpha_3$ – дійсні, а ω – додатне, є необхідною умовою можливості динамічної синхронізації віброзбудників.

Розглянемо практично найбільш цікавий випадок, коли парціальні частоти крайніх роторів віброзбудників однакові $L_1(\omega) - R_1(\omega) = L_3(\omega) - R_3(\omega)$.

Тоді рівняння (3), в разі $\dot{\alpha}_i = 0$, можна записати у наступному вигляді:

$$\begin{cases} L_1(\omega) - R_1(\omega) + a \sin(\alpha_1 - \alpha_3) - 2b \cos(2\alpha_1 - \alpha_2) = 0, \\ L_2(2\omega) - R_2(2\omega) + b \cos(2\alpha_1 - \alpha_2) + b \cos(2\alpha_3 - \alpha_2) = 0, \\ L_1(\omega) - R_1(\omega) - a \sin(\alpha_1 - \alpha_3) - 2b \cos(2\alpha_3 - \alpha_2) = 0, \end{cases} \quad (4)$$

де $a = \frac{m^2 \varepsilon^2 \omega^2}{2M} \left(\frac{1}{1 - \lambda_x^2} + \frac{1}{1 - \lambda_y^2} - \frac{1}{1 - \lambda_\varphi^2} \frac{Mr^2}{I} \right)$, $b = \frac{4m^2 \varepsilon^2 m_2 \varepsilon_2 g}{I_1 M} \left(\frac{1}{4 - \lambda_x^2} + \frac{1}{4 - \lambda_y^2} \right)$.

Розглянемо питання про стійкість найбільш цікавого з практичної точки зору синфазного руху роторів віброзбудників, що обертаються з основною частотою $\alpha_1 - \alpha_3 = \alpha_{1-3}^{(i)} = 0$.

Щоб дослідити стійкість розглядуваних режимів руху, припустимо, що вона якимось чином була порушена і виник збурений рух. Введемо у систему малі збурення

$$\alpha_1 = x_1, \quad \alpha_2 = \alpha_2^{(i)} + x_2, \quad \alpha_3 = x_3.$$

Після підстановки збурень у (2), приходимо до наступної системи збуреного руху

$$\begin{cases} I_1 \ddot{x}_1 + k_1 \dot{x}_1 = a(x_1 - x_3) - 2b(2x_1 - x_2) \sin \alpha_2^{(i)}, \\ I_2 \ddot{x}_2 + k_2 \dot{x}_2 = 2b(x_1 - x_2 + x_3) \sin \alpha_2^{(i)}, \\ I_3 \ddot{x}_3 + k_3 \dot{x}_3 = -a(x_1 - x_3) - 2b(2x_3 - x_2) \sin \alpha_2^{(i)}. \end{cases}$$

Часткові розв'язки системи рівнянь у варіаціях будемо шукати у вигляді $x_1 = A_1 e^{\lambda t}$, $x_2 = A_2 e^{\lambda t}$, $x_3 = A_3 e^{\lambda t}$. Відповідне характеристичне рівняння системи (4) запишемо у вигляді двох рівнянь

$$\begin{vmatrix} I_1 \lambda^2 + k_1 \lambda + 4b \sin \alpha_2^{(i)} & -4b \sin \alpha_2^{(i)} \\ -2b \sin \alpha_2^{(i)} & I_2 \lambda^2 + k_2 \lambda + 2b \sin \alpha_2^{(i)} \end{vmatrix} = 0,$$

$$I_1 \lambda^2 + k_1 \lambda - 2a + 4b \sin \alpha_2^{(i)} = 0.$$

Стійкість розглядуваних синхронних рухів залежить лише від знаків дійсних частин цих характеристичних рівнянь. У випадку задачі про внутрішню синхронізацію, коли використовуються лише асинхронні двигуни, один з коренів буде рівний нулю, усі інші корені повинні мати від'ємні дійсні частини.

Аналізуючи знаки коренів другого рівняння одержуємо відповідну умову стійкості

$$2b \sin \alpha_2^{(i)} - a > 0.$$

Розглядаючи перше характеристичне рівняння з використанням критерію Рауса-Гурвіца, отримуємо наступну умову стійкості

$$\sin \alpha_2^{(i)} > 0. \quad (9)$$

З нерівностей (9) слідує, що стійким буде фазування $\alpha_2^{(i)} = \beta$, а умова стійкості набере вигляду

$$\frac{Mr^2}{I} \frac{1}{1-\lambda_\phi^2} - \frac{1}{1-\lambda_x^2} - \frac{1}{1-\lambda_y^2} + \frac{16m_2\varepsilon_2g}{I_2\omega^2} \left(\frac{1}{4-\lambda_x^2} + \frac{1}{4-\lambda_y^2} \right) \sin \beta > 0. \quad (10)$$

Зроблено практично важливу задачу про двократну самосинхронізацію трьох дебалансних віброзбудників, симетрично розміщених на пружно підвішеному тримковому тілі з урахуванням жорсткості пружної підвіски. Отримані більш точні вирази для вібраційних моментів, диференціальні рівняння повільних процесів встановлення синхронних рухів роторів збудників, умови існування та стійкості їх кратно-синхронних обертань.

PACS 78.30.Fs

SOME PROBLEMS OF MODELLING THE RELAXED OPTICAL PROCESSES IN INDIUM ANTIMONITE AND INDIUM ARSENIDE

P. Trokhimchuck, B. Fedik

*Anatolii Svidzinskii Department of Theoretical and
Computer Physics, Lesya Ukrainka Volyn National University,
Voly av. 13, Lutsk, Ukraine, 43025*

trope1650@gmail.com, Trokhimchuck.Petro@vnu.edu.ua, fedikbogdan@gmail.com

We present the simplest models of Relaxed Optics that explain the regularities of the distribution profiles of donor centers in indium antimonite and indium arsenide after irradiation with 20 ns pulses of a Ruby laser [1-4]. These models have the kinetic and dynamic nature and can be carried out using a modified system of equations for the internal photoeffect [1-3]. Only change non-equilibrium processes must be change to irreversible ones.

At the same time, the main physical characteristics are the processes of kinetic formation of irreversible changes in irradiated materials (in the case of antimonite and indium arsenide, these are two-photon processes), and the dynamic ones are thermodiffusion processes [1-3]. As diffusion coefficients, phenomenological diffusion coefficients can be selected, referring to specific experimental data (one-diffusion approximation); or for double compounds the photostimulated diffusion (self-diffusion) coefficients of the material components (indium and antimony for indium antimonide, indium and arsenic for indium arsenide) [1-4].

In the single-diffusion approximation, the problem of the "tail" parts of the distribution of the induced radiation of a 20 ns Ruby laser in indium antimonite and indium arsenide is poorly explained [1-3]. The two-diffusion approximation explains both the problem of the emergence of donor centers and their further evolution, including the nature of the tail parts of the distribution profiles [1-3].

The disadvantages of this modeling method include the problem of irreversible changes in the irradiated material. It is most simply explained using the methods of physical chemistry and crystallography (saturation model of the corresponding type and number of bonds in the excitation

saturation mode) [1-3]. In this case, a two-dimensional lattice of sphalerite is used. It should be noted that the problem of studying the intrinsic absorption of light of high intensities in solids is rather poorly studied [1-3]. As a rule, attention is paid only to the radiative relaxation of primary excitations. Irreversible processes are dealt with by radiation physics of a solid body, which, as a rule, focuses on

photostimulated subthreshold defect formation. For quantum electronics, self-absorption processes are too rigid, and for radiation physics, solids are too soft. Therefore, there is a need to find other more effective modeling methods.

However, the matter changes significantly when the light fluxes become significantly larger [1, 3]. It is appropriate to use the modeling methods given here for such processes.

1. Trokhimchuck P. P. Foundations of Relaxed Optics. Lutsk: Volyn University Press Vezha, 2011. 627 p.

2. Trokhimchuck P. P. Nonlinear and Relaxed Optical Processes. Problems of Interactions. Lutsk: Vezha-Print, 2013. 280 p.
3. Trokhimchuck P. P. Relaxed Optics: Realities and Perspectives. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing, 2016. 250 p.
4. Trokhimchuck P. P. Mathematical Foundations of Knowledge. Polymetrical Doctrine. Lutsk: Vezha-Print, 2014. 624 p. (In Ukrainian)

УДК 004.94, 517.9

НЕРЕГУЛЯРНІ СІТКИ ДЛЯ ЗАДАЧ З ЦЕНТРАЛЬНОЮ СИМЕТРІЄЮ ПРИ ЧИСЛОВИМУ ІНТЕГРУВАННІ СПЕЦІАЛЬНИХ ФУНКЦІЙ Д.М. Шваліковський

*ВНУ імені Лесі Українки, кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики імені
А. В. Свідзинського, dshvaliko@vnu.edu.ua*

При розгляді широкого ряду задач математичної фізики, що моделюють процеси теплопровідності, дифузії, поширення електромагнітних хвиль, досить часто виникає можливість використання центральної симетрії задачі, та зведення відповідних рівнянь до одновимірного вигляду. Кутові залежності при цьому виключаються, а оператор Лапласа зводиться до своєї радіальної частини у вигляді $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$ – для сферичних координат, та $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$ – для полярних координат. Аналітичний розв'язок при цьому міститиме спеціальні функції Бесселя ($J_\nu(r)$, $Y_\nu(r)$) або Ганкеля ($H_\nu(r)$). Прямого функціонального представлення таких спецфункцій не існує, їх можна записати лише у вигляді певного інтегрального перетворення або суми диференціального ряду.

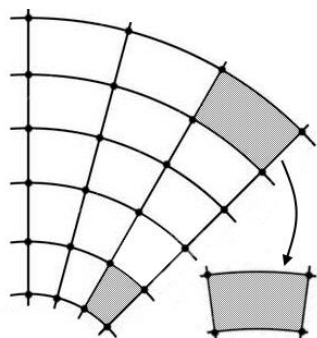
У практичних обчисленнях виникає необхідність числового інтегрування вказаних функцій. При цьому область інтегрування розбивається на скінченну кількість частин, всередині кожної з яких шукається значення функції, та провадиться сумація з відповідними ваговими коефіцієнтами. Центральним питанням такої схеми є точність отриманого результату. Для дослідження цієї проблеми зазвичай використовують вже відому еталонну функцію, що може бути отримана аналітично.

```
>>> %Run polar_text1.py  
  
polar = [3.1423780517529973, 16004000]  
cartesian = [3.141584749336717, 16008001]  
pi = 3.141592653589793  
  
>>>
```

Рис 1. Результат обчислень у **Python**.

При числовому інтегруванні вказаних функцій перехід до полярних координат значно зменшує обчислювальні потужності, оскільки фактично справу потрібно мати з одновимірними списками, тоді як у декартових координатах це двовимірні масиви. Однак виявляється, що при цьому виникає значна похибка. У задачі про коливання круглої мембрани числовий розрахунок у програмному середовищі **Python** при обранні однакової кількості вузлів сітки (16 млн), похибка обчислень виникає вже у третьому знакові після коми у полярних координат, тоді як у декартових це відбувається на п'ятому знакові.

Розрахунки показують, що результат інтегрування у 1000 разів точніший у декартових координатах, ніж у полярних. Тобто



для досягнення такої ж точності необхідно на багато порядків збільшувати кількість вузлових точок сітки. Причина цього є зрозумілою, з огляду на геометрію диференціації областей. Поділивши область інтегрування на елементарні, неявно приймається, що всі вони є рівнозначними, тобто дають однаковий

Рис. 2. Елементарні області в полярних координатах. вклад в результат. Тим не менше, вже із Рис. 2 видно, що елементарні комірки біля межі інтегрування значно відрізняються від центральних в сторону збільшення. У декартових координатах області розділені рівномірно, і деформація відбувається лише на межових комірках, котрих зазвичай значно менше ніж внутрішніх.

Одним з варіантів вирішення цієї проблеми є відмова від рівномірного розбиття сітки, тобто перехід до нерегулярного розподілу густини вузлових точок. Комп'ютерний експеримент підтверджує, що ефективним методом обчислень є встановлення відстані між вузлами i та $i + 1$ обернено пропорційною до r_i , або до середньої ваги вузлів $(r_i + r_{i+1})/2$. Результати обрахунків відображені на Рис. 3.

```
>>> %Run polar_text2.py  
  
nonregular = [3.1415926532020535, 160000000]  
cartezian =[3.141584749336717, 16008001]  
pi = 3.141592653589793  
  
>>>
```

Рис. 3. Результати обрахунків у **Python** для нерегулярної сітки.

Як видно, точність при цьому зросла до 9-го правильного знаку після коми, при збереженні одновимірності задачі.

1. Adalberto Gomes da Silva Júnior et al. Numerical Simulation of a One-Dimensional Non-Linear Wave Equation. // Engineering, Technology & Applied Science Research Vol. 12, No. 3, 2022, pp. 8574-8577.

2. John M. Stewart. Python for Scientists. – Cambridge University Press, 2016. – 232 p.

3. Крєневич А.П. Python у прикладах і задачах. Частина 2. Об'єктно-орієнтоване програмування. Навчальний посібник – К.: ВПЦ "Київський Університет", 2020. – 152 с.

4. Letícia Helena Paulino de Assis, Estaner Claro Romão. Numerical Simulation of 1D Heat Conduction in Spherical and Cylindrical Coordinates by Fourth-Order Finite Difference Method. // International Journal of Mathematics Trends and Technology (IJMTT) – Volume 46 Number 3 June 2017, – pp. 125-128.

ГІДРОДИНАМІКА БОЗЕ-ГАЗУ ЗА НАЯВНОСТІ КОНДЕНСАТУ

П. Шигорін

*Кафедра теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського Волинського національного університету імені Лесі Українки, Просп. Воли 13, Луцьк, Україна, 43025
E-mail: pashyh@gmail.com*

У роботі проведено теоретичне дослідження нульового звуку в конденсованому бозе-газі. Для цього було розглянуто беззіткневу динаміку атомарного конденсованого бозе-газу при відмінних від нуля температурах. Отримано дисперсійне співвідношення для швидкості розповсюдження нульового звуку.

Однією із найцікавіших задач статистичної механіки є дослідження динаміки колективних мод. У випадку рідин та газів колективні моди мають гідродинамічну природу і проявляються у вигляді звукових хвиль. Особливо розмаїтими є гідродинамічні моди у квантових рідинах та газах. Наприклад, у надплинному гелії-4 крім звичайних звукових хвиль (першого звуку) можуть поширюватися температурні хвилі (другий звук) [1]. Поява в надплинному гелії поряд із першим звуком другого звуку пов'язана із дворідинною структурою гідродинамічних рівнянь, що в свою чергу відбиває наявність в системі бозе-

айнштайнівського конденсату. Мовою дворідинної моделі перший звук відповідає синфазним коливанням нормальної та надплинної компонент, другий – протифазним. Іншим прикладом багаточастинкової системи за наявності квантового виродження зі зломом симетрії є атомарний конденсований бозе-газ, що охолоджений до ультранизької температури (порядку десятків нанокельвінів) і утримується в магнітній пастці. Як показує теоретичний розрахунок [2], у такій системі можуть поширюватися перший та другий звук, а також теплова релаксаційна мода. На відміну від надплинного гелію-4, у якого через сильну взаємодію між атомами розділення нормальної та надплинної компоненти є неможливе, в конденсованому бозе-газі перший звук асоціюється із коливаннями густини атомів надконденсату, а другий звук – коливання густини конденсатних атомів.

У теорії фермі-рідини Ландау [3, 4] було передбачено особливий тип колективних коливань, які пов'язані із коливаннями фермі-сфери. Через те, що такі коливання можуть відбуватися при абсолютному нулі температур, відповідна колективна мода отримала назву нульовий звук. Колективні коливання, які мають подібні до нульового звуку властивості виникають у плазмі в беззіткневному режимі, коли можна знехтувати зіткненнями між частинками, тобто коли інтеграл зіткнень дорівнює нулеві [4]. Поява такого колективного руху пов'язана із далекодією кулонівських сил.

У даній роботі проводиться теоретичне дослідження нульового звуку в атомарному конденсованому бозе-газі. Для цього розглядається беззіткнева кінетика цього виродженого квантового газу.

Динаміка конденсованого бозе-газу при відмінних від нуля температурах описується на основі рівнянь руху для двох величин: вігнерівської функції розподілу атомів над конденсату $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ та макроскопічної хвильової функції конденсату $\Phi = \Phi(\mathbf{r}, t)$. Відповідна система рівнянь побудована в роботах [4]. Вони мають вигляд

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_c}{\partial t} + \nabla(n_c \mathbf{v}_c) &= R[f], \\ m \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_c \nabla \right) \mathbf{v}_c &= -\nabla \mu_c, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) - \nabla V_{eff}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = C_{22}[f] + C_{12}[f, \Phi], \quad (2)$$

де

$$f = f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t), \quad f_i = f(\mathbf{p}_i, \mathbf{r}, t), \quad \tilde{\varepsilon}_c = \mu_c + \frac{m v_c^2}{2}, \quad \tilde{\varepsilon}_{p_i} = \frac{p_i^2}{2m} + V_{eff}, \quad n_c = |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2.$$

В правій частині рівняння (2) фігурує інтеграл зіткнень, що складається з двох доданків: $C_{22}[f]$ та $C_{12}[f, \Phi]$.

$$C_{12}[f, \Phi] = \frac{2g^2 n_c}{(2\pi)^2 \hbar^4} \int d\mathbf{p}_1 \int d\mathbf{p}_2 \int d\mathbf{p}_3 \delta(m\mathbf{v}_c + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3) \delta(\tilde{\varepsilon}_c + \tilde{\varepsilon}_{p_1} - \tilde{\varepsilon}_{p_2} - \tilde{\varepsilon}_{p_3}) \times \quad (3)$$

$$\times [\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) - \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_2) - \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_3)] [(1 + f_1)f_2 f_3 - f_1(1 + f_2)(1 + f_3)],$$

$$C_{22}[f] = \frac{2g^2}{(2\pi)^5 \hbar^7} \int d\mathbf{p}_2 \int d\mathbf{p}_3 \int d\mathbf{p}_4 \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \delta(\tilde{\varepsilon}_p + \tilde{\varepsilon}_{p_2} - \tilde{\varepsilon}_{p_3} - \tilde{\varepsilon}_{p_4}) \times \quad (4)$$

$$\times [(1 + f)(1 + f_2)f_3 f_4 - f f_2(1 + f_3)(1 + f_4)],$$

Інтеграл зіткнень (4) описує двочастинкові зіткнення між збудженими атомами надконденсату, тоді як (3) описує зіткнення між атомами надконденсату, які «захопили» один атом конденсату. Обидва інтеграли забезпечують виконання законів збереження енергії та імпульсу. Інтеграл зіткнень $C_{22}[f]$ водночас забезпечує збереження числа атомів у конденсаті, $C_{12}[f, \Phi]$ описує взаємодію атомів конденсату та надконденсату, тобто можливі переходи із конденсату в теплову хмарину і навпаки.

Для опису нульового звуку маємо розглянути беззіткневу динаміку. Таким чином маємо покласти інтеграли зіткнень рівними нулеві. Отже будемо виходити із наступної системи рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_c}{\partial t} + \nabla(n_c \mathbf{v}_c) &= R[f], \\ m \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_c \nabla \right) \mathbf{v}_c &= -\nabla \mu_c, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) - \nabla V_{eff}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = 0, \quad (6)$$

Перейдемо до побудови дисперсійного співвідношення між частотою та хвильовим числом. Звукову хвилю вважаємо процесом поширення періодичного збурення густини. Розглядаючи малі відхилення від стану рівноваги, який характеризується параметрами: n_{c0} , $\tilde{n}_0$ — рівноважні густини конденсату та теплової хмарини; $\mathbf{v}_{c0} = 0$ — швидкість конденсату;

$$\begin{aligned} f_0 &= \frac{1}{e^{c^2 + \beta g n_{c0}} - 1} \text{ — рівноважна функція розподілу. Покладемо} \\ n_c(\mathbf{r}, t) &= n_{c0} + \delta n_c \exp(ikz - i\omega t), \quad f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = f_0 + f_0[1 + f_0]h_0(\mathbf{p})\exp(ikz - i\omega t). \end{aligned} \quad (7)$$

При цьому слід вважати, що відхилення від рівноваги є малими, тобто виконуються співвідношення $|\delta n_c| \ll n_{c0}$, $|h_0| \ll f_0$.

Підставляючи співвідношення (7) у рівняння (5) і (6) та проводячи процедуру лінеаризації, одержуємо рівняння

$$c_z k [h_0(\mathbf{c}) + 2A\tilde{n}_0(\mathbf{c})] - \omega_0 h_0(\mathbf{c}) = 0, \quad (8)$$

$$\text{де } A = \frac{\beta g \frac{\omega_0^2}{k^2} + \frac{\beta^2 g^2 n_{c0}}{2}}{\frac{\omega_0^2}{k^2} - \frac{\beta g n_{c0}}{2}}, \quad \mathbf{c} = (\beta/2m)^{1/2} \mathbf{p}.$$

З урахуванням співвідношення

$$\tilde{n}_0(\mathbf{c}) = \frac{1}{\pi^{3/2} \Lambda^3} \int d\mathbf{c} f_0(1 + f_0)h_0(\mathbf{c}),$$

рівняння (8) набуде вигляду

$$c_z k \left[h_0(\mathbf{c}) + 2A \frac{1}{\pi^{3/2} \Lambda^3} \int d\mathbf{c} f_0(1 + f_0)h_0(\mathbf{c}) \right] - \omega_0 h_0(\mathbf{c}) = 0, \quad (9)$$

Ми отримали інтегральне рівняння для визначення відхилення функції розподілу від рівноважної.

Перепишемо (9) у іншому вигляді

$$\left(\frac{\omega_0}{ck} - \cos \theta \right) h_0(\mathbf{c}) = 2A \frac{1}{\pi^{3/2} \Lambda^3} \cos \theta \int d\mathbf{c} f_0(1 + f_0)h_0(\mathbf{c}), \quad (10)$$

Це рівняння подібне до відомого дисперсійного співвідношення для нульового звуку в теорії Ландау фермі-рідини [3]. Розв'язок цього рівняння визначає поправку h до локально-рівноважної функції розподілу f_0 , а також швидкість поширення нульового звуку.

1. Nozieres P. Theory of quantum liquids: superfluid Bose liquids [Text] / P. Nozieres, D. Pines. – Addison-Wesley. 1990. – 180 p.

2. Шигорін П. П. Дисперсійне співвідношення для хвиль першого та другого звуків у конденсованих атомарних бозе-газах / П. П. Шигорін, Ю. М. Лящук // Наук. вісн. Волин. нац. ун-ту ім. Лесі України. Фізичні науки. – 2010. – № 6. – С. 58-63.
3. Zaremba E. Dynamics of trapped Bose gas at finite temperatures [Text] / E. Zaremba, T. Nikuni, A. Griffin // Journ. Low Temp. Phys. — 1999. — Vol 116. — p. 277-298.
4. Shygorin P. Equations of coupled condensate and non-condensate dynamics in a trapped Bose gas / P. Shygorin, A. Svidzynskyj // Ukr. J. Phys. – 2010. – Vol. 55. – No. 5. – P. 554-559.

УДК 538.9

РЕЗОНАНСНЕ ТУНЕЛЮВАННЯ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ

П. Шигорін, Д. Скорубський, К. Хаймик

Волинський національний університет імені Лесі України

Україна, 43025 м. Луцьк просп. Волі, 13

shygorin.pavlo@vnu.edu.ua

У даній роботі проведено теоретичне дослідження квантового тунелювання електронів крізь подвійний δ – функційний бар'єр в магнітному полі. Актуальність такого дослідження пов'язана з тим, що такого типу бар'єр описує надпровідний тунельний шаруватий контакт типу SISIS або SINIS (Рис. 1). В таких тунельних контактах можуть виникати джозефсонівські струмові стани [1]. Критичний струм у контактах є залежним від прозорості потенціального бар'єру. Зокрема може спостерігатися резонансне тунелювання, за якого прозорість бар'єра дорівнює одиниці. Така поведінка коефіцієнта прозорості тунелювання крізь подвійний бар'єр є подібною до явища просвітлення оптики. У даній роботі ми досліджуємо вплив магнітного поля на прозорість потенціального бар'єра, а відтак його вплив на величину критичного струму в тунельному контакті.

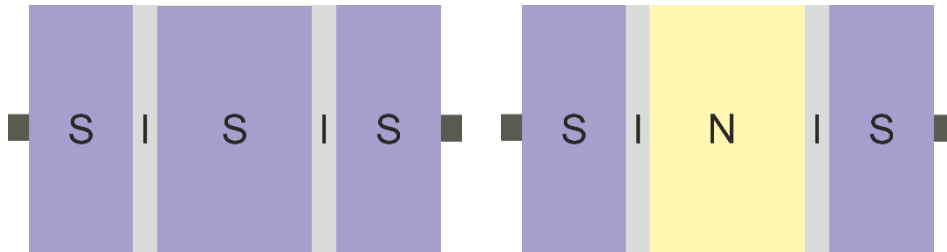


Рис.1 Моделі SISIS та SINIS тунельних контактів.

У нашій моделі оператор Гамільтона зарядженої частинки в електромагнітному полі має вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 + e\varphi,$$

де φ - скалярний потенціал, $\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H} \vec{r}]$ – вектор-потенціал, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор імпульсу.

Ізолятори моделюються δ – функційним потенціальним бар'єром.

Рівняння Шредінгера в області нормального металу:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \right] \psi = E\psi.$$

Розв'язки: $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(xp_x + zp_z)} \chi(y)$.

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} a_H^{\frac{1}{2}} \sqrt{2^n n!}} \exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2a_H^2} \right] H_n \left(\frac{y - y_0}{a_H} \right)$$

Зшивка розв'язків у трьох областях дає результат

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=0} - \frac{d\psi_1}{dx} \Big|_{x=0} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi_1(0) \\ \frac{d\psi_3}{dx} \Big|_{x=a} - \frac{d\psi_2}{dx} \Big|_{x=a} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi_1(a) \\ A + 1 = [B + C]\chi(0), \\ \left[B e^{\frac{i}{\hbar}ap} + C e^{-\frac{i}{\hbar}ap} \right] \chi(0) = D e^{ika}, \\ \frac{i}{\hbar} p \chi(0) [B - C] + ikA - ik = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} (A + 1), \\ ik D e^{ika} - \frac{i}{\hbar} p \chi(0) \left[B e^{\frac{i}{\hbar}ap} - C e^{-\frac{i}{\hbar}ap} \right] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} D e^{ika}. \end{array} \right.$$

Звідси ми знаходимо вираз для коефіцієнта прозорості потенціального бар'єру, який має вигляд

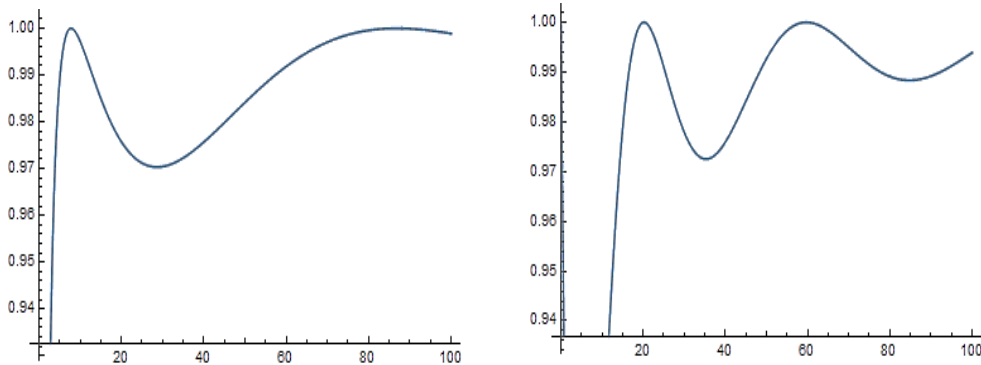
$$T = |D|^2 = DD^* = \frac{4k^4}{\beta^2(\beta \sin ka - 2 \cos ka k)^2 + 4k^4}$$

Також маємо умову резонансу

$$\beta \sin ka - 2 \cos ka k = 0$$

Графічні залежності коефіцієнта проходження від відносної енергії налітаючих електронів за відсутності магнітного поля (рисунок ліворуч) та за його наявності (рисунок праворуч) наведені внизу

Бачимо, що при увімкненні магнітного поля резонансний максимум зміщується, а також



з'являється додатковий резонансний максимум. Таким чином, у результаті маємо чутливість тунельного контакту до магнітного поля, що може бути використане для створення магніточутливого сенсора.

1. P. Shygorin, B. Venhryn, Journal Of Physical Studies, v. 24, No. 4, 4706-4711 (2020).

МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ МІЖДИФУЗНОГО ШАРУ ТОНКОПЛІВКОВОГО СОНЯЧНОГО ЕЛЕМЕНТА НА ОСНОВІ CdTe

Л.О. Яворська, Л.І. Никируй

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57,
м. Івано-Франківськ, 76018, Україна,
lilia.katanova@pnu.edu.ua*

Телурид кадмію (CdTe) є одним із перспективних матеріалів для недорогих і високоефективних фотоелектричних пристроїв завдяки його властивостям, прямої забороненої зони, що добре відповідає сонячному спектру АМ 1,5G, високим коефіцієнтам поглинання близько 10^5 см^{-1} , а теоретичний ККД досягає близько 29%. Попередні найкращі рекорди ефективності близько 16% для сонячних елементів CdTe трималися протягом майже десятиліття, доки суттєві покращення ефективності не були зроблені за останні роки компанією First Solar і General Electric (GE) і сягнули рівня 22.1% [1-2].

Раніше було проведено різноманітні дослідження з моделювання пристрою сонячних елементів CdTe. Повідомлялося про те, як час життя носіїв, густина носіїв заряду, зворотні контактні бар'єри, товщина плівки CdTe та буферний шар впливають на характеристики сонячних елементів CdTe. У процесі осадження тонкоплівкових гетероструктур процес поверхневої дифузії, який є основним, дозволяє контролювати однорідність плівки в горизонтальному (латеральному) і нормальному напрямках. Транспорт з парової фази (зростання шару) контролює однорідність плівки, що додатково впливає на електричні, оптичні та фізико-хімічні властивості отриманих гетероструктур. Ріст однорідної структури може підтримуватися лише тоді, коли в процесі росту забезпечується достатня кількість атомних переходів між шарами плівки. Це означає, що атом який знаходиться на вершині острівця зростання з високою ймовірністю може переміститися в нижній шар, де потенційна енергія нижче. Отже, дослідження структури в поперечному перерізі дає можливість оцінити процеси самоорганізації та механізми росту в залежності від умов осадження. Взаємна дифузія матеріалів є такою ж важливою, як і утворення точкових дефектів в тонкоплівкових сонячних елементах, коли товщина шару CdTe не перевищує 1 мкм.

Щоб визначити механізми вдосконалення сонячних елементів на основі CdTe проводилось дослідження за допомогою чисельного моделювання та симуляції комірки у програмному середовищі SCAPS. Основною метою було дослідження критичних факторів, що визначають ефективність сонячних елементів CdTe. Використовуючи моделювання, створено базову модель пристрою та проведено оптимізацію досліджуючи розширену модель із наявністю дифузійного шару CdTe для сонячних елементів CdTe. Наведено та проаналізовано домінуючі фактори підвищення ефективності. Крім того, запропоновано потенційні шляхи подальшого підвищення ефективності понад 21%.

1. Green, Martin A., et al. "Solar cell efficiency tables (Version 64)." Progress in Photovoltaics: Research and Applications 32.7 (2024): 425-441.

2. Nakamura M, Yamaguchi K, Kimoto Y, Yasaki Y, Kato T, Sugimoto H. Cd-free Cu (In,Ga)(Se,S)₂ thin-film solar cell with a new world record efficacy of 23.35%. In: 46th IEEE PVSC. Vol. 9, 6; 2019.

Секція 5. Методологія навчання фундаментальних дисциплін у вищій школі

УДК 378.091+ 514.912+ 514.912

НЕОБХІДНІСТЬ СТВОРЕННЯ ДОПОМІЖНИХ МАТЕРІАЛІВ ОКРЕМИХ РОЗДІЛІВ МАТЕМАТИКИ ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В КУРСІ ФІЗИКИ

Т.В. Авдєєва¹, Т.Г. Чижська²

¹ Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені
Ігоря Сікорського», e-mail avdeeva.tetyana@gmail.com

² Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені
Ігоря Сікорського», e-mail chijskaya@gmail.com

Болонська система — це система вищої освіти, започаткована у 1999 році з метою гармонізації освітніх стандартів у європейських країнах.

В Україні впровадження Болонської системи розпочалося у 2005 році і включає в себе:

- Адаптацію навчальних планів до європейських стандартів.
- Запровадження кредитної системи ECTS, що полегшує мобільність студентів.
- Акредитацію програм відповідно до європейських вимог.

Перехід української технічної освіти на європейські стандарти є важливим кроком для інтеграції країни в європейський освітній простір та підвищення конкурентоспроможності випускників на міжнародному ринку праці.

Але, поруч із позитивними аспектами переходу української системи навчання на європейські стандарти, існують і недоліки.

Зокрема, ми проаналізували недоліки в базовій технічній освіті, а саме в курсі фізики та запропонували один із шляхів усунення деяких з них.

Математика та фізика не просто два окремі предмети, а основні дисципліни, що формують ядро технічної освіти. Їх взаємозв'язок пронизує практично всі аспекти досліджуваних процесів та явищ. Математика є мовою, за допомогою якої фізика описує навколишній світ, дозволяє моделювати і програмувати фізичні явища з достатньою точністю. Математика та фізика, у політехнічному інституті на більшості факультетах, викладаються паралельно в першому семестрі і курс фізики математично випереджає курс математики.

На першому курсі студенти знайомляться з основами аналізу та алгебри, які стають інструментами для вирішення фізичних задач. Наприклад, задачі з кінематики та динаміки, коливальні процеси, тощо. Розуміння математичних принципів, таких як диференціювання та інтегрування, дає можливість якісно засвоїти курс фізики. Поняття «інтегрування» та «диференціювання», студенти отримують вже в старшій школі, а от поняття «диференціальні рівняння» для першокурсників є новим. У них не сформований даний математичний апарат, оскільки диференціальні рівняння вивчаються у курсі вищої математики в другому семестрі [1], а фізичні задачі з використанням диференціальних рівнянь першого та другого порядків розв'язують в першому семестрі.

В результаті, багато студентів відчувають труднощі у розумінні глибин фізичних законів та явищ, оскільки їм не вистачає необхідних математичних знань та навиків роботи за певними алгоритмами. Це призводить до недостатнього засвоєння матеріалу та ускладнює не тільки подальше вивчення фізики, а й вивчення наступних фахових дисциплін, що базуються на курсі фізики.

Крім того, такий підхід може відлякувати багатьох студентів від вивчення фізики, оскільки вони відчувають, що не справляються з матеріалом і не мають необхідних передумов для їх успішного оволодіння базовими знаннями.

Отже, проблема випередження курсом фізики курсу математики в технічних ВНЗ може призвести до труднощів у засвоєнні матеріалу та зниження якості освіти.

Ми пропонуємо кілька можливих підходів для вирішення цієї проблеми:

- Спільні заняття: Організація інтегрованих уроків, де фізика та математика викладаються в контексті однієї теми, може допомогти студентам бачити взаємозв'язок між дисциплінами.
- Проектні роботи: Створення проектів, що вимагають одночасного використання знань з фізики та математики.
- Адаптація графіка: Перегляд розкладу, щоб забезпечити паралельне вивчення основних математичних тем під час вивчення фізики.
- Спільні семінари: Проведення спільних семінарів та тренінгів для викладачів фізики та математики.
- Консультації: Запровадження додаткових занять або консультацій з математики.
- Онлайн-курси: Використання онлайн-ресурсів для самостійного вивчення математичних тем, що дозволить студентам освоювати матеріал у зручному для них темпі.
- Використання зворотного зв'язку для коригування навчальних підходів.
- Застосування методів, які зосереджуються на вирішенні конкретних проблем, що вимагають знань з обох дисциплін.
- Формування групових проектів, які спонукають студентів співпрацювати та використовувати знання з математики в фізичних задачах.

Деякі із запропонованих підходів неможливо застосувати із-за вже складеного та затвердженого навчального плану, деякі потребують великого додаткового навантаження на викладачів. Деякі заходи, такі як консультації, заплановані в навчальному плані та використовуються в повному обсязі.

Але, в умовах воєнного стану та існуючої проблеми з світлопостачанням, ми прийшли до висновку, що одним із оптимальних способів вирішення даної проблеми є створення методичного посібника. Отже, посібник «Диференціальні рівняння та їх використання в курсі фізики» стане в нагоді для самостійної роботи студента та допоможе в засвоєнні матеріалу.

Даний посібник має наступну структуру:

1. Диференціювання та інтегрування функції однієї змінної.
2. Диференціальні рівняння першого порядку (з відокремлюваними змінними, однорідні, лінійні I порядку, диференціальні рівняння Бернуллі).
3. Диференціальні рівняння другого порядку (лінійні та нелінійні, однорідні та неоднорідні, зі спеціальною правою частиною та правою частиною загального типу тощо).

Висновок:

Збалансування курсів фізики та математики в технічних ВНЗ вимагатиме комплексного підходу, інтеграції методів навчання та співпраці викладачів [2]. Важливо, щоб студенти мали можливість засвоювати матеріал у зручному для них темпі і отримували необхідну підтримку.

1. Авдєєва, Т. В. Звичайні диференціальні рівняння першого порядку. Практикум [Електронний ресурс] для студентів інженерних спеціальностей денної форми навчання всіх напрямів підготовки / Т. В. Авдєєва, О. Б. Качасенко, Л. М. Іллічева ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,72 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського», 2024. – 210 с. – [URI https://ela.kpi.ua/handle/123456789/67883](https://ela.kpi.ua/handle/123456789/67883)

2. Дюженкова О.Ю., Чижевська Т.Г. Про застосування математичних понять при вивченні фізики. XIX Міжнародна наукова конференція імені академіка Михайла Кравчука, присвячена 125-річчю КПІ ім. Ігоря Сікорського, 11–12 жовтня 2023 року, Київ, КПІ ім. Ігоря Сікорського. <https://matan.kpi.ua/media/2023/kravchuk-conf-2023/kravchuk2023-abstracts.pdf>

УДК 004.8

USE OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE PLATFORMS IN HIGHER EDUCATION

O.B. Bilenka, M.M. Romaniuk, I.V. Petrovych

Lviv Polytechnic National University, Stepan Bandera 12, Lviv, 79013, Ukraine

olha.b.bilenka@lpnu.ua

This work examines the effectiveness of using artificial intelligence (AI) programs and platforms in higher education from the point of view of the ethics of their use. Data on the activity of using AI programs by students of higher educational institutions are presented.

Let's try to briefly investigate the impact of artificial intelligence on the teaching and learning process, evaluate its effect in the assessment of student knowledge, and predict the impact on the future career of graduates. In our short study, we will use a qualitative approach based on a survey of a high school audience. As will be shown below, artificial intelligence is effective in providing graduates with new skills for their future career growth, so higher education institutions need to integrate AI more widely into their training programs for future specialists in various fields (and not only the IT field).

AI has the potential to personalize learning methods according to the individual needs of students, provides fast feedback and automates the creation by teachers and the solving of tasks by students of various complexity, while not simplifying them and allowing creative and balanced application of already known AI platforms, relying on previously acquired knowledge and skills. This will have important implications for educators and other stakeholders in the higher education sector. Research findings [1,2] show that AI should be more integrated into higher education curricula, and institutions need to consider the ethical implications of using AI when designing and implementing their programs.

On the other hand, is it ethical to use AI in higher education and research? This issue was raised back in 2018 by Prof. Holmes, who argued that whether we like it or not, AI will significantly affect the future of higher education, and the adoption of ethical standards for its application is all the more important [3]. He also added that in 2024-2025, the global AIED market will amount to 4.5 billion pounds, and such giants as Google, Facebook and Amazon will invest millions of dollars in the development of AI in education, which we are currently observing [3,4]. However, he believes that "adaptive" or "personalized" ethical learning of systems has not been fully taken into account. He also emphasizes that there is a "moral vacuum" without guidelines, policies, regulations, or research outlining the specific ethical issues raised by the use of AI in education. From these considerations, we conclude that higher education should give more importance precisely to the ethical part during training with the help of AI.

Participants of the Open University (Great Britain, 2018) at the International Education Conference together with OpenAI reflected on the importance of work on eliminating systematic biases in machine learning models and creating black boxes with an "impenetrable" algorithm and implementing AI ethics courses. In particular, the use of the Internet program "Chatbots", which is designed to simulate communication with users using text messages through websites, messengers to support students and employees.

Educational institutions should also take care of security and privacy issues. When it comes to AI, this is a pressing issue, despite the rosy prospects and promises, as intelligent systems can control our faces 24 hours a day and only some elements of our private lives remain intact. Thus, AI raises many social problems that are more complex than technological ones, in particular questions of ethics, privacy, inequality of participants in the educational process, and therefore we need graduates with deep and thorough knowledge not only in the field of technology, but who are intellectually mature and have a stable citizenship, high ethical norms capable of compassion.

As our surveys have shown, students most often use ChatGPT omni and Grammarly in their educational work due to their accessibility and ease of use. In addition, despite certain "hallucinations" (i.e. malfunctions, mainly for ChatGPT 3rd version), these AI products show the highest ability to "learn" (Machine Learning) and are therefore most in demand.

1. Dizikes, P. (2020). How many jobs do robots really replace? | MIT News | Massachusetts Institute of Technology.
<https://news.mit.edu/2020/how-many-jobs-robots-replace-0504>
2. Chin, R. T. (2018). Education in the Artificial Intelligence Era - QS WOWNEWS.
<https://qswownews.com/education-in-the-artificial-intelligence-era/>
3. Drabwell, C. (2018). Ethics in Artificial Intelligence in Education: Who Cares? – OU News. https://ounews.co/education-languages-health/ethics-in-artificial-intelligence-in_education-who-cares/#
4. Edtech. (2020). Successful AI Examples in Higher Education That Can Inspire Our Future / EdTech Magazine. <https://edtechmagazine.com/higher/article/2020/01/successful-ai-examples-higher-education-can-inspire-our-future>

ВИКОРИСТАННЯ СМАРТФОНІВ ПРИ ВИКЛАДАННІ КУРСУ ЗАГАЛЬНОЇ ФІЗИКИ О.Б. Біленька, М.М. Романюк, І.В. Петрович

*Національний університет «Львівська політехніка»
бул. Степана Бандери 12, Львів, 79013, Україна
mykola.m.romaniuk@lpnu.ua*

Повсюдне використання смартфонів вносить нові можливості у навчання і викладання у закладах вищої освіти. Стандартне використання смартфонів для пошуку інформації у мережі Інтернет, останнім часом доповнюється отриманням чи надсиланням інформації про виконані студентами обов'язкові індивідуальні завдання, забезпеченням доступу до Віртуального Навчального Середовища, виконанням тестових завдань, та заповненням Google – форм при проходженні поточного оцінювання у семестрі та при проходженні семестрового контролю.

Разом з тим, смартфони забезпечують додаткові можливості, які не є широко відомими і рідко використовуються у повсякденному житті. Перелічимо деякі з них.

1. Для вимірювання тривалості досліджуваних процесів, наприклад, періодів коливання маятників, часу витікання рідини у віскозиметрі, часу опускання кульки у віскозиметрі, який працює з використанням методу Стокса, часу прецесії гіроскопа під дією прикладеного моменту сил, часу заряджання чи розряджання конденсатора при вивченні перехідних процесів у електричних колах постійного струму, та інших фізичних дослідженнях.

2. Для полегшення читання показів приладів із дуже дрібними поділками шкал. Такими є, зокрема, шкали штангенциркулів та мікрометрів, якими при точних вимірюваннях потрібно користуватися, дивлячись на шкали перпендикулярно до них. Для полегшення читання показів запропоновано фотографувати шкали штангенциркуля, або мікрометра, і читати їх покази після збільшення розміру фотографії на екрані смартфона. Іншою важливою особливістю такого способу при вивченні шкал приладів є можливість показати видиму фотографію усім студентам, знаючи, що фотографії шкал приладу при русі смартфона не змінять результатів вимірювань.

3. Для полегшення читання результатів вимірювань із шкал рефрактометрів, чи приладів для вимірювання оптичного повертання площини поляризації, у яких дуже мала глибина різкості. Тому, оскільки оптична сила очей викладача та студентів часто дуже істотно

відрізняються, зроблена за допомогою смартфона фотографія шкал вказаних приладів дає змогу студентам за допомогою своїх окулярів, або контактних лінз, побачити чітко шкали приладів уже на екрані смартфона, а за обмежень у часі – просто сфотографувати усі покази шкал, і прочитати числові значення результатів вимірювань уже за межами лабораторії.

4. При спостереженні картин дифракції променя лазера на екрані установки – наявність у смартфона камери дозволяє сфотографувати дифракційну картину, інтерференційну картину ліній рівної товщини, або кільця Ньютона, і далі вести вимірювання по фотографії, не піддаючи очі експериментатора небезпеці тривалого освітлення променем лазера.

5. Якщо встановити програму для вимірювання яскравості світла, камера смартфона дозволяє вивчати, наприклад, закон Малюса для поляризованого світла, вимірюючи залежність інтенсивності світла, яке пройшло через систему поляризатор – аналізатор, як функцію кута повороту між їх головними площинами.

6. Якщо смартфон оснащений давачем Холла, можна встановити із Google Play програму для вимірювання індукції, або напруженості магнітного поля, скажімо, для перевірки зв'язку між силою струму в соленоїді, та створеній ним індукції магнітного поля всередині соленоїда.

7. Можна встановити програму для електронного магнітного компаса, який дозволяє вимірювати магнітний азимут об'єктів на місцевості. Однак, знаючи, що смартфон вимагає заряджання акумулятора приблизно раз на добу, не рекомендуємо відмовлятися від старого доброго безвідмовного магнітного компаса при подорожах у Карпатах, чи у лісистій місцевості, де різко обмежена видимість.

8. У Google Play є програми, які дозволяють використати смартфон у ролі джерела звуку, частота якого визначається цифровим методом з дисплея смартфона. Так можна досліджувати утворення стоячих хвиль у повітрі, або, маючи два такі смартфони – досліджувати явище биття. Крім цього, такі програми можуть вимірювати частоту звуку, що можна використати у фізичному експерименті.

9. Є програми, які, використовуючи мікрофон смартфона, можуть вимірювати силу звуку, та дозволяють досліджувати розподіл інтенсивності звуку у просторі при утворенні у повітрі стоячої хвилі.

10. Продаються малогабаритні блоки з лічильниками Гейгера – Мюллера, підключивши які до смартфона, та встановивши відповідну програму – можна вимірювати природний радіоактивний фон, насамперед – коли маємо справу із його низькими значеннями. Правда, вартість такого блока може бути у околі 2000 гривень.

11. Як варіант використання смартфонів, можна назвати дистанційну роботу із програмами віртуального фізичного практикуму, один із яких – розроблений фірмою РНЕТ. За необхідності, тут можна знайти наочно виконані та добре ілюстровані фізичні ігри, які дозволяють змінювати величини фізичних параметрів досліджуваних систем, і зразу бачити промодельований відгук досліджуваної системи на внесені зміни. Однак, частина таких програм може бути платною.

Тут перелічені далеко не всі можливі варіанти застосування сучасних смартфонів у лабораторному практикумі з фізики. Однак, навіть перелічені вище застосування можуть становити інтерес при роботі із сучасними студентами, які не уявляють свого життя без сучасних гаджетів, бо для них будь – яке нове застосування такої техніки викликає ентузіазм, цікавість, та спроби повторити побачене самостійно. Крім того, наведені можливості використання смартфонів різко полегшують процес навчання та роботи у лабораторіях для студентів, що мають проблеми із зором, і при цьому не виставляють їх у якесь особливе становище, не наголошують на їхніх проблемах із зором.

УДК 372.87:793.4

ЗАСТОСУВАННЯ ІНФОРМАЦІЙНО-КОМУНІКАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ ФОРМУВАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ КОМПЕТЕНТНОСТЕЙ

О.В. Гуда, Т.А. Крадінова

Луцький національний технічний університет

В час «ковідних» обмежень та воєнного стану освітнє середовище в Україні зазнає суттєвих змін. Інформаційно-комунікаційні технології вводяться у викладання всіх дисциплін. Цифровізація закладів освіти відкриває великі перспективи щодо покращення якості та інноваційності організації освітнього процесу.

У ЗВО важливою є робота над розвитком професійних навичок випускників. Компетентнісний підхід дозволяє формувати універсальний профіль спеціаліста, враховуючи інтереси особистості та суспільства. Для розвитку компетенцій студентів усіх спеціальностей математичні дисципліни є чи не найважливішими. Адже формування критичного мислення, пошук інноваційних рішень, розвиток просторової уяви, вміння систематизувати та обробляти інформацію, розв'язувати та досліджувати, навички самостійної роботи – якості, які необхідно мати випускнику ВНЗ, щоб бути конкурентно спроможним на ринку праці.

Зокрема, при викладанні дисциплін «Вища математика», «Лінійна алгебра та теорія чисел», «Аналітична геометрія», «Теорія ймовірності» впровадження цифрових технологій відкриває нові можливості для вдосконалення навчального процесу, що сприятиме швидкому засвоєнню інформації, розвитку просторової уяви.

Інформаційно-комунікаційні технології (ІКТ) становлять собою набір технологічних рішень, які дозволяють здійснювати пошук, збір, обробку, створення, передачу і презентацію інформації, а також її управління та використання для різноманітних комунікаційних цілей. Для ефективного впровадження вказаних освітніх програм рекомендується застосування спеціалізованого програмного забезпечення для математики, включаючи педагогічно-орієнтовані системи для підтримки математичних занять (навчальні програмні засоби) та професійні математичні пакети, призначені для математиків-експертів [1]. Прикладні програмні забезпечення для навчального призначення, які можна застосовувати:

1. «WebAlmir» – це платформа для дистанційного навчання, створена для підтримки курсу лінійної алгебри у вищих навчальних закладах.

2. ППЗ «KAlgebra» – це математичний калькулятор, який дозволяє виконувати базові обчислення (арифметичні та логічні операції) та створювати дво- та тривимірні графіки.

3. «Mathcad» – це система комп'ютерної математики, яка містить сотні операторів та вбудованих функцій для розв'язання різноманітних технічних завдань [2].

Отже, формування математичних компетентностей студентів засобами інформаційно-комунікаційних технологій спонукає студентів до самостійної навчальної діяльності, розвиває їхню когнітивну активність та незалежність, сприяє систематизації набутих знань, їх упорядкуванню та поглибленню.

1. Мокрицька Г.М., Семенишина І.В., Гуда О.В. Формування математичних компетентностей студентів економічних спеціальностей засобами інформаційно-комунікаційних технологій. «Вісник науки та освіти»: журнал. 2023. № 12(18) 2023. 1058 с., С. 638-653

2. Крадінова Т.А., Гуда О.В., Тимошук В.М. Візуалізація навчального процесу при вивченні курсу вищої математики//SCIENCE, TRENDS AND PERSPECTIVES. Abstracts of XVII International Scientific and Practical Conference. Tokyo, Japan 18-19 May, 2020. – 227-227 с. ISBN - 978-1-64871-420-7.

ТРАНСФОРМУВАННЯ ЗМІСТУ ОСВІТНІХ КОМПОНЕНТІВ У STEM-НАПРЯМКАХ О.І. Гулай, М.О. Демчук

Луцький національний технічний університет, м. Луцьк, вул. Львівська 75
mariademchuk40@gmail.com.ua

STEM-підхід – один із проривних інструментів трансформації сучасної вищої освіти. Він безпосередньо пов'язаний з формуванням і розвитком не тільки професійних, але й загальних компетентностей фахівців, які сьогодні стали більш затребувані на ринку праці [1]. Інтеграція за рахунок міждисциплінарного зв'язку основних наукових сфер – природничі науки (Science), технології (Technology), проектування (Engineering, дизайн) і математика (Mathematics) є методологічною основою концепції STEM [2].

Соціальна роль STEM пов'язана з: прийнятою моделлю промислового розвитку, впливом економічних вимог на формування освітніх програм, вихованням науково грамотних і творчих громадян, які вибирають STEM професії. [2]

Як зазначають фахівці Державної наукової установи “Інститут модернізації змісту освіти”, «...використання провідного принципу STEM-освіти – інтеграції, дозволяє здійснювати модернізацію методологічних засад, змісту, обсягу навчального матеріалу предметів природничо-математичного циклу, технологізацію процесу навчання» [3]. Реалізація принципів STEM у закладах вищої освіти забезпечується на чотирьох основних рівнях, наведених рисунку 1.

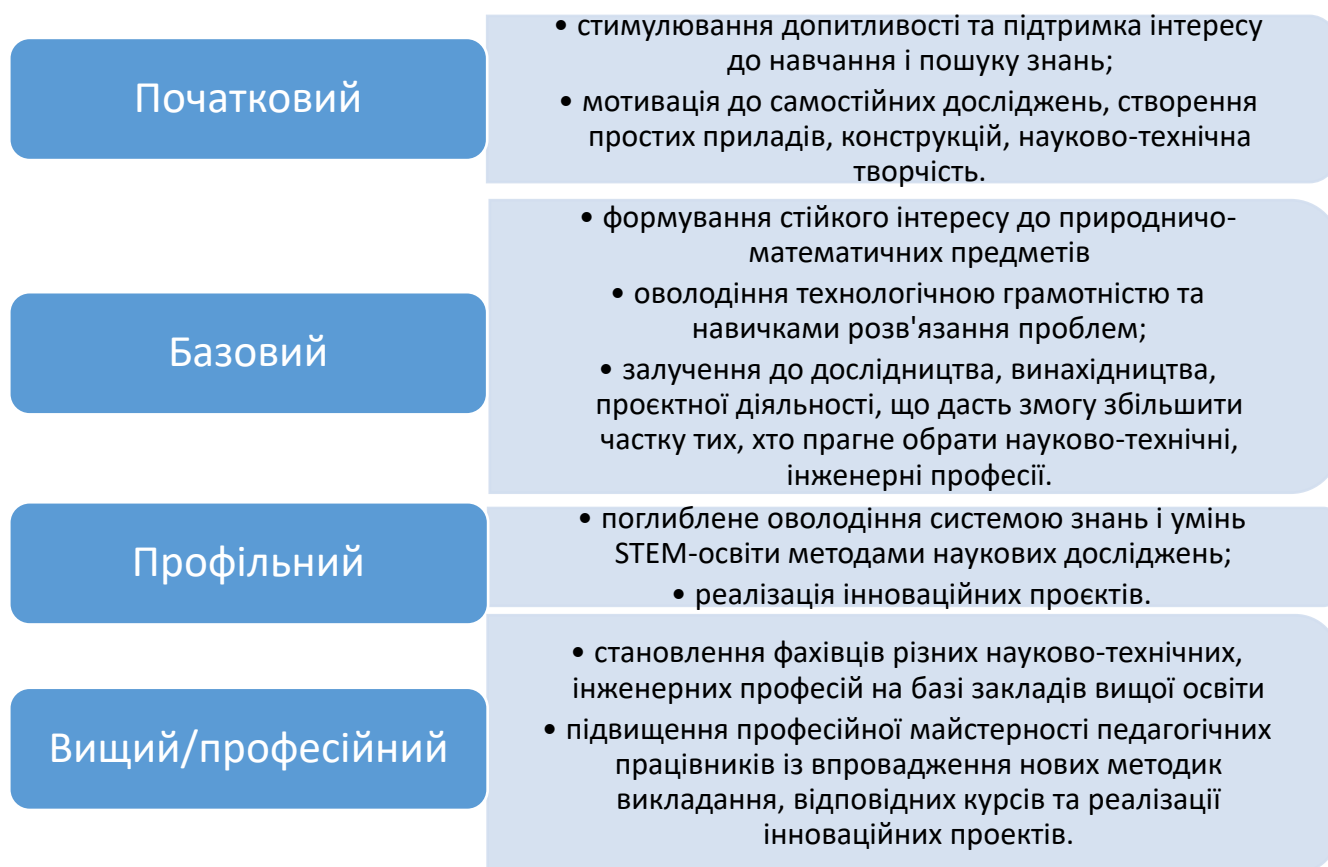


Рисунок 1 – Рівні впровадження принципів STEM (укладено на основі [3])

STEM-освіта запроваджується в умовах формальної, неформальної, інформальної освіти. Викладання фундаментальних дисциплін (вищої математики, фізики, хімії, біології тощо) для здобувачів вищої технічної освіти спрямовується у практичне русло. Стратегія STEM є одним із напрямів вдосконалення освітніх програм Професійна освіта (комп'ютерні технології) та Середня освіта (Інформатика), що реалізуються на кафедрі цифрових освітніх технологій Луцького національного технічного університету. Як приклад можна навести трансформацію освітньої компоненти «Фізика» у «Фізичні основи інформаційних систем». Завдяки зміні акцентів та використанню нових способів пізнання посилюється навчальна мотивація, покращуються когнітивні навички майбутніх фахівців.

Основною перевагою розглянутого напрямку вважаємо інтеграцію змісту та методології природничих наук, використання математичного інструментарію та сучасних інформаційних технологій задля розуміння та розробки інженерного дизайну цифрових пристроїв.

1. Кузьменко, О. С. (2017). Інноваційні засоби та форми організації навчального процесу з фізики в умовах розвитку stem-освіти в вищих технічних навчальних закладах. Наукові записки [Кіровоградського державного педагогічного університету імені Володимира Винниченка]. Серія: Проблеми методики фізико-математичної і технологічної освіти, (12 (2)), 85-92.
2. Сліпчишин, Л. В., & Стечкевич, О. (2022). Особливості впровадження STEAM підходу у вищу освіту. Молодь і ринок, 2 (200), 17-22.
3. STEM-освіта [URL:https://imzo.gov.ua/stem-osvita/](https://imzo.gov.ua/stem-osvita/) (дата доступу 19.09.2024)

УДК 37.016:543

РОЗВИТОК КРИТИЧНОГО МИСЛЕННЯ ЯК КЛЮЧОВИЙ ФАКТОР ЕФЕКТИВНОГО ВИКЛАДАННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН І.А. Мороз

Луцький національний технічний університет, м. Луцьк.

i.moroz@lntu.edu.ua

У контексті сучасного розвитку суспільства, для якого притаманним є необмежений доступ до інформації та швидкий розвиток технологій, здатність критично мислити стає не просто корисною навичкою, а необхідною умовою для успішного навчання та професійного розвитку. Особливо це стосується природничих наук, зокрема хімії, де критичне мислення є фундаментальним фактором у процесі формування когнітивних й практичних навичок та відіграє провідну роль у формуванні майбутніх фахівців та науковців, здатних ефективно вирішувати комплексні завдання в галузі хімічних наук та суміжних областях.

Розвиток критичного мислення є високоефективною методологією для опанування природничих дисциплін та набуття важливих життєвих компетенцій. Критичне мислення визначається як науково-когнітивна здатність (scientific cognitive ability) до синтезу знань на основі наявних даних та їх аналітичного опрацювання з метою розв'язання конкретних завдань [1, 2]. По суті, критичне мислення включає комплекс навичок з аналізу та синтезу інформації, її об'єктивної оцінки та формулювання обґрунтованих висновків. У контексті вивчення хімії це виявляється у здатності проводити дослідження хімічних процесів, встановлювати взаємозв'язки між явищами, формулювати релевантні запитання щодо природи досліджуваних явищ, розробляти альтернативні підходи до розв'язання проблем та аргументовано відстоювати власні наукові позиції.

Оновлення освітніх стратегій відповідно до сучасних технологій є ефективним шляхом розвитку критичного мислення здобувачів освіти. Адже інноваційні підходи стимулюють активне навчання та сприяють досягненню запланованих результатів. Водночас, традиційні

методики часто обмежують творчий потенціал і не враховують особливості цифрового покоління. Тому варто регулярно оновлювати стратегії викладання, впроваджувати інтерактивні форми, проекти, дискусії. Це дозволить розвивати аналітичні здібності, вміння формулювати й аргументувати позицію. Зрештою, поєднання креативних підходів та сучасних технологій є запорукою успішного навчання й всебічного розвитку особистості, формування висококваліфікованого фахівця.

Останніми роками у вищій освіті домінує теоретичне навчання з мінімальними практичними навичками. Це спричинено обмеженням на практичну діяльність в лабораторіях через карантинні соціальні обмеження та воєнні дії. Крім того, навчання часто призводить студентів до запам'ятовування формул без розуміння користі матеріалу. Цю проблему можна подолати за допомогою інноваційного проектного навчання для розвитку критичного мислення [3].

У викладанні хімічних дисциплін використовують різні стратегії, щоб зробити навчання цікавішим, полегшити запам'ятовування та наблизити студентів до реального життя. Деякі з них включають вибір ефективних методів викладання та навчання, впровадження інноваційних технологій, використання мультимедійних засобів, змішане та електронне навчання, нові моделі навчання тощо.

Однією зі стратегій оптимізації навчання є використання інноваційних освітніх ресурсів, отриманих за допомогою проектного навчання. Навчання на основі проєктів спрямоване на залучення студентів до дослідницької діяльності. Ця модель дає змогу учням систематично робити наукові відкриття за допомогою критичного мислення. Проєктне навчання може здійснюватися через лабораторні дослідження, польові дослідження та практичні завдання, що сприяє поглибленню наукових знань і навичок. Проєктне навчання повинно здійснюватися систематично, починаючи з визначення цільових компетентностей, планування, розробки та виконання проєкту, звітування про результати та висновки. Під час роботи над проєктом студенти мають час застосувати навички критичного мислення, щоб поглибити знання з хімії.

Таким чином, впровадження стратегій розвитку критичного мислення має бути пріоритетним напрямком у методології викладання хімічних дисциплін. Ця компетенція є фундаментальною для формування комплексу необхідних навичок, що забезпечують становлення здобувача освіти як висококваліфікованого фахівця в галузі хімії. Розвинене критичне мислення сприяє підвищенню аналітичних здібностей, покращенню навичок інтерпретації експериментальних даних та формуванню здатності до синтезу нових знань на основі існуючих парадигм. Більше того, воно стимулює розвиток креативного підходу до вирішення нестандартних задач, що є особливо цінним у контексті сучасних викликів хімічної науки та промисловості.

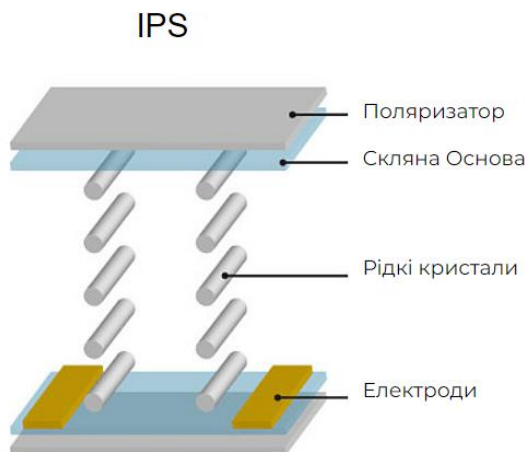
1. Styers M.L., Van Zandt P.A., Hayden K.L. Active learning in flipped life science courses promotes development of critical thinking skills. *CBE Life Sci Educ.* 2018. № 17(3). p. ar39.
2. Hartman J.R., Nelson E.A., Kirschner P.A. Improving student success in chemistry through cognitive science. *Foundations of Chemistry.* 2022. № 24(2). p. 239-261.
3. Juliandini G., Situmorang M., Muchtar Z. An Innovative Chemistry learning material with project and multimedia to developed students thinking skill on the teaching of anion analysis. *Educ Humanit Res.* 2020. № 488. p. 97-103.

УДК 621.397.3

IPS МАТРИЦІ: АНАТОМІЯ ТА ФУНКЦІОНУВАННЯ

М.В. Чорнобай, Н.А. Якимчук

*Луцький національний технічний університет,
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, Україна, qzmpgal@gmail.com*



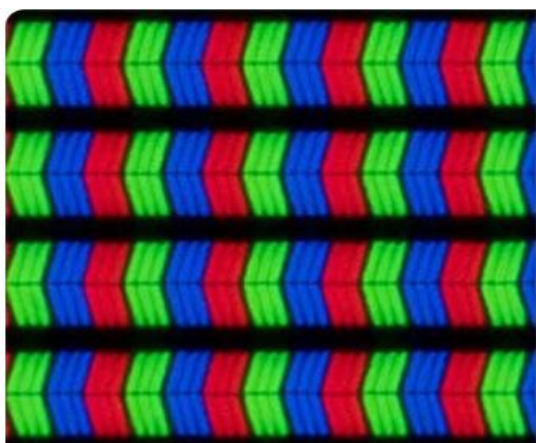
Технологія IPS (In-Plane Switching) стала справжнім проривом у сфері рідкокристалічних дисплеїв. Її розробили з метою вирішення ключових проблем попередніх типів дисплеїв, таких як TN (Twisted Nematic) [1]. IPS матриці стали популярними завдяки високій якості передачі кольорів, широким кутам огляду та стабільному зображенню, що робить їх ідеальним варіантом як для професійної роботи, так і для звичайних користувачів.

Перша версія IPS з'явилася у середині 1990-х років. Це було відповіддю на обмеження TN матриць, які на той час домінували на ринку. Головною проблемою було викривлення зображення під різними кутами огляду та не дуже

висока якість кольорів. Потреба у більш точних та якісних зображеннях стимулювала розробку нової технології, яку назвали IPS.

Перші версії IPS мали значні покращення у порівнянні з TN, але залишалися проблеми із часом відгуку та енергоспоживанням [2]. З розвитком технологій, IPS екрани стали більш досконалими, з'явилися нові модифікації, такі як S-IPS, H-IPS та інші. Вони пропонували більш високу контрастність, швидший відгук і кращу енергоефективність.

В основі IPS матриці лежить рідкокристалічна технологія, коли кристали здатні змінювати своє положення під дією електричної напруги. В IPS матрицях кристали повертаються паралельно поверхні крану, що дає перевагу в куті огляду та стабільності зображення.



IPS

Світлодіоди (LED) забезпечують рівномірне підсвічування дисплея, оскільки самі рідкі кристали не випромінюють світло. Світло проходить через шари рідких кристалів і поляризаційні фільтри, що допомагає створювати зображення.

Поляризаційні фільтри. Їх завдання - контролювати, як світло проходить через дисплей. Перший фільтр поляризує світло, що виходить від підсвічування, а рідкі кристали керують цим світлом, дозволяючи або блокуючи його проходження через другий фільтр [3]. Це забезпечує точну передачу кольорів та контрастність зображення. Коли до рідких кристалів не подається напруга, вони залишаються в положенні, яке блокує світло, і пікселі на екрані виглядають чорними. При

подачі електричної напруги кристали змінюють свою орієнтацію і пропускають світло, що дозволяє відображати різні кольори та відтінки.

Однією з ключових особливостей IPS матриць є те, що рідкі кристали рухаються паралельно площині екрану. Це робить можливим отримання широких кутів огляду та забезпечує більш точну передачу кольорів у порівнянні з іншими типами матриць.

Особливості та переваги IPS. Однією з найбільших переваг IPS технології є можливість перегляду зображення під великим кутом без значних спотворень. Зазвичай кути огляду можуть досягати 178°, що робить IPS дисплеї ідеальними для спільного перегляду контенту або професійної роботи з графікою [4].

Точна передача кольорів. IPS дисплеї забезпечують високу якість передачі кольорів завдяки більш точному управлінню рідкими кристалами. Це робить їх кращим вибором для дизайнерів, фотографів і всіх, кому важлива точна передача кольорів.

Стабільність зображення. IPS технологія дозволяє зберігати чіткість зображення незалежно від кута перегляду, а також запобігає ефекту "colorshift", коли кольори змінюються під час зміни кута огляду.

Недоліки IPS матриць [5]. Одним з основних недоліків ранніх версій IPS матриць був довший час відгуку порівняно з TN дисплеями. Це могло призводити до розмиття зображення при швидкому русі, що є проблемою для геймерів. Однак сучасні модифікації IPS, такі як Fast IPS, значно зменшили цей недолік. Хоча IPS матриці забезпечують високу якість зображення, вони все ж мають нижчу контрастність порівняно з VA матрицями. Це означає, що темні сцени можуть виглядати не такими насиченими.

IPS дисплеї споживають більше енергії порівняно з іншими типами РК-матриць через складнішу структуру рідких кристалів і необхідність більш потужного підсвічування. Проте новітні розробки в технології підсвічування, такі як Mini-LED, допомагають знизити енергоспоживання.

S-IPS (Super IPS) - одна з перших модифікацій, яка забезпечує кращу передачу кольорів і кутів огляду. Вона також вирішує проблему часу відгуку, роблячи його швидшим порівняно з попередніми версіями.

H-IPS (Horizontal IPS). Ще один розвиток технології, що пропонує ще кращу контрастність і передачу кольорів. Вона також використовує більш ефективне підсвічування, що дозволяє знизити енергоспоживання і підвищити якість зображення.

Fast IPS та Nano IPS. Це сучасні варіанти IPS, які націлені на скорочення часу відгуку і покращення кольорової гами. Fast IPS дозволяє досягати часу відгуку до 1 мс, що робить ці дисплеї конкурентоспроможними навіть у порівнянні з TN матрицями.

Для поліпшення якості чорного кольору та загальної контрастності можна розглянути застосування нових типів підсвічування, таких як Mini-LED або Micro-LED. Ці технології дозволяють краще контролювати яскравість і забезпечити більш насичені темні кольори.

Зниження енергоспоживання. IPS дисплеї можуть стати ще більш енергоефективними завдяки впровадженню нових матеріалів для рідких кристалів і вдосконаленню електричних схем. Це особливо важливо для мобільних пристроїв, де енергозбереження відіграє ключову роль.

Висновок: технологія IPS стала одним з основних стандартів для високоякісних дисплеїв завдяки своїй точній передачі кольорів, широким кутам огляду та стабільності зображення. Хоча вона має деякі недоліки, такі як час відгуку і контрастність, постійні вдосконалення роблять IPS дисплеї ще кращими і доступнішими.

1. <https://gsm-forsage.com.ua/blog/post/ips-and-oled-v-chomu-riznycia-perevahy-ta-nedoliky>
2. <https://boss-pc.com.ua/tipi-matrits-tn-va-ips-pls/>
3. <https://ek.ua/ua/post/2556/157-tipy-matric-monitorov-tn-ips-mva-va-pls-ads-wva-sva-ewv/>
4. <https://wookie.com.ua/ua/blog/shcho-take-matritsya-ekrana-i-v-chomu-riznitsya-mizh-lcd-ips-oled-amoled-ta-inshimi-tekhnologiyami/>
5. https://uk.wikipedia.org/wiki/In-Plane_Switching

УДК 378.147.88

ПРАКТИКА НА ВИРОБНИЦТВІ ЯК ЗАСІБ ЗАЛУЧЕННЯ СТУДЕНТІВ ВИЩИХ НАВЧАЛЬНИХ ЗАКЛАДІВ ДО ВПРОВАДЖЕННЯ ІННОВАЦІЙ НА ПІДПРИЄМСТВІ

Г.П. Шаварова, А.Г. Кевшин

*Волинський національний університет імені Лесі Українки,
пр. Воли, 13, м. Луцьк, 43035, Україна, e-mail: shavarova.hanna@vnu.edu.ua*

Невід’ємною частиною більшості освітніх програм у вищих навчальних закладах є практика на виробництві. Мета практики - закріпити теоретичні знання, отримані здобувачами освіти під час навчання, сформувані професійні уміння, поглибити фахові компетентності [1]. Для підвищення ефективності практики і в Україні, і за кордоном розроблені численні методичні рекомендації, які містять детальні інструкції для роботодавців і студентів щодо проведення виробничої практики, планування, оцінки та зворотного зв'язку [2, 3]. До керівництва практикою на підприємствах залучаються досвідчені висококваліфіковані працівники. Ці зусилля спрямовані на те, щоб студенти отримали практичні навички, які неможливо повністю засвоїти в аудиторії, розвинули вміння, які необхідні для їхньої майбутньої професії, і зробили більш усвідомлений вибір у своїй кар’єрі.

Проте співпраця з навчальними закладами у проведенні практики також вигідна і підприємствам з кількох причин, які стосуються як економічних переваг, так і довгострокових стратегічних перспектив.

Студенти-практиканти вищих навчальних закладів можуть відігравати важливу роль у впровадженні інноваційних технологій на підприємстві завдяки своїм сучасним знанням, новим підходам та ентузіазму. Студенти отримують освіту на базі новітніх технологій, методів і теорій, що часто ще не застосовуються на підприємствах. Вони можуть запропонувати нові технології або покращити вже існуючі процеси завдяки використанню сучасних наукових досягнень та підходів, що вивчаються в університетах.

Так наприклад, у ВНУ імені Лесі Українки на спеціальності «Прикладна фізика та наноматеріали» за побажаннями роботодавців, які приймають студентів на практику, до освітнього компонента «Електроніка» включена тема «Паяння як метод з’єднання компонентів електронних пристроїв», в якій розглядаються сучасні паяльні техніки. Також частина студентів спеціальностей, пов’язаних з прикладною фізикою, комп’ютерною фізикою, щороку проходить практику і залишається працювати на підприємстві з виготовлення поліграфічної рекламної продукції. Вибірковий освітній компонент «Фізичні основи обробки зображень», включений до програми на прохання керівників підприємства, з одного боку, підвищує конкурентоспроможність випускників, з іншого – сприяє активному впровадженню на підприємстві нових методів друку та покращенню його якості.

Таким чином, студенти, які навчаються за сучасними програмами, проходячи практику на виробництві, приносять на підприємства нові знання та ідеї. Вони можуть запропонувати інноваційні підходи до вирішення технологічних проблем.

1. Положення про проведення практики здобувачів освіти Волинського національного університету імені Лесі Українки (затверджено 29.08.2024 р.). Url https://ed.vnu.edu.ua/wp-content/uploads/2024/09/2024-Положення_про_практику-1-1.pdf

2. Best Practices for Internship Programs by The National Association of Colleges and Employers (NACE). URL: <https://www.nacweb.org/talent-acquisition/internships/15-best-practices-for-internship-programs/>

3. Організація та проходження практики на виробництві: методичні рекомендації для здобувачів освіти спеціальностей 104- Фізика та астрономія і 105-Прикладна фізика та наноматеріали [Електронний ресурс] / Г. П. Шаварова, А. Г. Кевшин, Г. П. Кобель. Луцьк, 2023. 23 с. URL: <https://evnuir.vnu.edu.ua/handle/123456789/23180>

УДК 376

**ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ПРИ ВИВЧЕННІ
РОЗДІЛУ «КОЛИВАННЯ І ХВИЛІ» У ЗЗСО
В.І. Шпак, О.В. Новосад**

*Волинський національний університет імені Лесі Українки, пр. Волі, 13, м. Луцьк,
43025, Україна, novosad.oleksiy@vnu.edu.ua*

Розвиток освіти перш за все передбачає зміну та оновлення її змісту. На сьогоднішньому етапі розвитку стоїть завдання навчити здобувача освіти мислити, створювати щось нове, шляхом спроб і помилок знаходити істину. У зв'язку із цим особлива увага приділяється створенню належних умов для розвитку особистісного потенціалу здобувачів освіти та розширення можливостей поглибленої освіти, у тому числі фізичної [1].

Фізика займає одне з основних місць серед дисциплін у ЗЗСО. Як навчальний предмет вона формує у здобувачів освіти уявлення про наукову картину світу. З усього різноманіття методів, які використовує сучасна фізична наука, особливе значення мають спостереження та експеримент, які є найефективнішими методами пізнання.

Експеримент покликаний розкрити фізику для здобувачів освіти як науку експериментів та дослідів, що виконує різні навчальні функції: знайомство з новим явищем; вимірювання кількісних характеристик явища; перевірка закону, що вивчається; формування у здобувачів освіти дослідних здібностей тощо.

Для формування та розвитку практичного досвіду в учнів на уроках фізики особливе місце відводиться демонстраційному експерименту та фронтальній лабораторній роботі. Фізичний експеримент на уроках фізики формує у здобувачів освіти навички, що ґрунтуються на набутих раніше уявленнях про фізичні явища та процеси, доповнює та розширює кругозір. У ході експерименту, який здобувачі освіти проводять самостійно під час лабораторних робіт, вони вивчають закономірності фізичних явищ, пізнають методи їх дослідження, вчаться працювати з фізичними приладами та установками, тобто вчаться самостійно отримувати знання з досліду. Отримувати знання з експериментальних досліджень особливо важливо при вивченні тем, складних для розуміння. До таких можна віднести теми, пов'язані з коливаннями та хвилями. Коливальний рух є одним із найбільш поширених рухів матеріальних об'єктів. Зокрема, в повсякденному житті ми часто зустрічаємося з коливаннями та хвильовими процесами. Наприклад, «краса» звуку, погойдування під час їзди на наших дорогах, коливання дерев під поривами вітру тощо.

Практика показує, що у вчителів фізики часто виникають методичні труднощі в організації шкільного фізичного експерименту в контексті модернізації шкільної фізичної освіти. Разом з тим, шкільний фізичний експеримент - один із провідних методів шкільного курсу фізики, який виступає у ролі методу навчання, джерела знань та виду наочності. Суперечність між значимістю шкільного фізичного експерименту та недостатнім володінням вчителями методичними прийомами, що забезпечують максимальну самостійну активність учнів, може бути подолано організацією шкільного фізичного експерименту на основі системно-діяльнісного підходу за допомогою завдань, що активізують діяльність учнів. До таких завдань належать віртуальні лабораторні роботи з фізики з використанням інтерактивних комп'ютерних моделювань.

Проаналізувавши календарно-тематичне планування уроків фізики для 7 класу за новою програмою НУШ 2024 на 2024 - 2025 навчальний рік (70 годин, 2 години на тиждень) (Планування адаптоване для підручника авторів Бар'яхтар В. Г., Божинова Ф. Я., Довгий С. О., Кірюхін М. М., Кірюхіна О. О., за ред. Довгого С. О. (відповідно до модельної навчальної програми авторів Кременський Б. Г., Гельфгат І. М., Божинова Ф. Я., Ненашев І. Ю.,

Кірюхіна О. О.) бачимо, що вперше з темою «Коливання і хвилі» здобувачі освіти знайомляться під час вивчення теми «Рівномірний рух по колу. Коливальний рух». У даній темі передбачено виконання двох лабораторних робіт: «Визначення періоду обертання тіла» та «Дослідження коливань нитяного маятника». У 8 класі не передбачено вивчення коливань та хвиль. У 9 класі, відповідно до календарно-тематичного планування уроків фізики для 9 класу за новою програмою на 2024 - 2025 навчальний рік (105/87 годин, 3/2,5 години на тиждень) (дане планування сумісне з підручниками: Фізика : підруч. для 9 кл. загальноосвіт. навч. закл. / [В. Г. Бар'яхтар С. О. Довгий, Ф. Я. Божинова, О. О. Кірюхіна] ; за ред. В. Г. Бар'яхтара С. О. Довгого. — Харків : Вид-во «Ранок», 2017. — 272 с. : іл., фот., Фізика : підруч. для 9-го кл. загальноосвіт. навч. закл. / В.Д. Сиротюк. - Київ : Генеза, 2017. - 248 с. : іл., Фізика : підруч. для 9 кл. загальноосвіт. навч. закладів / Т. М. Засекіна, Д. О. Засекін. — К. : УОВЦ «Оріон», 2017. — 272 с. : іл.), здобувачами освіти вивчається розділ «Механічні та електромагнітні хвилі». У даному розділі передбачена одна лабораторна робота «Дослідження звукових коливань різноманітних джерел звуку за допомогою сучасних цифрових засобів». У 10 класі тема «Коливання та хвилі» не розглядається. Відповідно до Календарно-тематичного планування уроків фізики для 11 класу (рівень стандарту, за навчальною програмою авторського колективу під керівництвом Локтева В. М.) на 2024 - 2025 навчальний рік (105 годин, 3 години на тиждень) (сумісне з підручником: Фізика (рівень стандарту, за навчальною програмою авторського колективу під керівництвом Локтева В. М.): підруч. для 11 кл. закл. загал, серед, освіти / [Бар'яхтар В. Г., Довгий С. О., Божинова Ф. Я., Кірюхіна О. О.] ; за ред. Бар'яхтара В. Г., Довгого С. О. — Харків : Вид-во «Ранок», 2019. — 272 с. : іл., фот.) в 11 класі передбачено розділ «Електромагнітні коливання і хвилі». Тут пропонується експериментальна робота «Вимірювання індуктивності котушки». Як бачимо, ознайомлення учнів з коливаннями та хвилями здійснюється поступово, і для наочності пропонується одна або дві експериментальні роботи.

При вивченні тем, пов'язаних з коливаннями і хвилями, інтерес до експерименту як методу навчання обумовлений тим, що цей вид завдань дає можливість самостійно виявити першопричину фізичного явища на досліді під час безпосереднього розгляду. Базуючись на найпростішому обладнанні і навіть предметах побуту, експеримент наближає фізику до нас, перетворюючи її в уявленні здобувачів освіти з абстрактної системи знань на науку, що вивчає навколишній світ. Тим самим підкреслюється практична затребуваність фізичних знань, їх значимість у житті. У навчальному процесі, де широко використовується експеримент, немає потоку інформації, що виходить від педагога, немає нудьги, лінощів, пасивності учнів. Вчитель веде учня шляхом суб'єктивного відкриття.

1. Різак В. М., Литвинова С. Г., Соколюк О. М., Чобаль О. І. Шкільний фізичний експеримент з використанням цифрових вимірювальних комплексів: старша школа: навчально-методичний посібник. Ужгород: УжНУ «Говерла», 2019. 256 с.

2. Дементієвська Н.П., Соколюк О.М. Віртуальні лабораторні роботи з фізики з використанням інтерактивних комп'ютерних моделювань: збірник навчальних матеріалів. Київ: ЩО НАПН України, 2022. 157 с.

ЗМІСТ

Секція 1. Фізико-хімічні властивості та структура матеріалів

1.	Ю. М. Ажнюк, В. В. Лопушанський, А. І. Погодін, М. Й. Філеп, В. О. Юхимчук, В. М. Кришеник, І. М. Войнарович, О. В. Гомоннай ФОТОІНДУКОВАНЕ ОКИСЛЕННЯ ПОВЕРХНІ СКЛА $\text{As}_2\text{S}_3\text{:Ag}$ ПІД ДІЄЮ ВИДИМОГО СВІТЛА	3
2.	I. Arseniuk, B. Stelmakhovych ISOTHERMAL SECTION OF THE STATE DIAGRAM OF THE Dy – Zn – Al SYSTEM AT 500 °C	5
3.	Л. Бабінчук, В. Говдяк, І. Горічок АНТИСТРУКТУРНІ ДЕФЕКТИ У КРИСТАЛАХ PbTe ТА CdTe	7
4.	T. Babuka, A.V. Gomonnai, O.O. Gomonnai, I. Babuka STRUCTURAL, ELECTRONIC AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF Ag_3AsS_3 CRYSTAL: FIRST PRINCIPLE CALCULATION	8
5.	H. Ban, D. Gal, A. Haysak, I. Haysak, A. Molnar EFFECT OF RADIATION DEFECTS ON ELECTROPHYSICAL PARAMETERS OF LAYERED CuInP_2S_6 FERRIELECTRICS	9
6.	O. Ye. Barmin, S. V. Hryhorieva INFLUENCE OF BORADIATION PARAMETERS ON THE GROWTH KINETICS OF BORIDATION LAYERS ON MEDIUM-CARBON STEEL	10
7.	О.Є. Бармін, С.В. Григор'єва КІНЕТИКА РОСТУ БОРИДНИХ ШАРІВ НА ВИСОКОВУГЛЕЦЕВІЙ СТАЛІ	11
8.	Березнюк О.П., Зінич І.Б., Неведюк В.С., Алрікік М., Піскач Л.В. ВЗАЄМОДІЯ ГЕРМАНІЙ(СТАНУМ)(IV) ТА ФОСФОР(V) СУЛЬФІДІВ З ВИСОКИМ ВМІСТОМ АРГЕНТУМ(I) СУЛЬФІДУ ПРИ 500 К	12
9.	О.П. Березнюк, П.М. Деркач, Л.Д. Гулай, Л.В. Піскач ФІЗИКО-ХІМІЧНА ВЗАЄМОДІЯ МІЖ АРСЕН(III), СТАНУМ(IV) ТА КУПРУМ(АРГЕНТУМ(I) СУЛЬФІДАМИ	14
10.	К. Козоріз, І. Ворона, Л. Борковська ВПЛИВ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ НА СИМЕТРІЮ ТА ОПТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ІОНІВ Mn^{4+} В ОКСИДІ МАГНІЮ	16
11.	Н.М. Блашко, О.В. Марчук КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Pb}_3\text{-Nd}_{1.5}\text{Y(Tb)}_{1.5}\text{Ga}_{1.67}\text{S}_7$	17
12.	І.В. Вакалюк, Р.С. Яворський, М.Д. Грицяк, В.Ф. Глеб, Л.І. Никируй, С.А. Федосов ОСОБЛИВОСТІ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОСТРУКТУРИ $\text{Pt/CdS/CdTe/Cu/GLASS}$ ОТРИМАНОЇ МЕТОДОМ ФІЗИЧНОГО ОСАДЖЕННЯ З ПАРОВОЇ ФАЗИ	19
13.	О.С. Васильчук, Д.С. Кустовський, С.П. Старик, А.Л. Майстренко ВПЛИВ РІЗНИХ ТИПІВ ПОКРИТТІВ ДЛЯ ПОКРАЩЕННЯ АНТИФРИКЦІЙНИХ ТА АНТИПІТТІНГОВИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПАР ТЕРТЯ “НІТРИД КРЕМНІЮ” – “ПІДШИПНИКОВА СТАЛЬ” (ОГЛЯД СТАНУ ПРОБЛЕМИ)	21
14.	В.М. Ващинський ДОСЛІДЖЕННЯ УМОВ ТА РЕЖИМІВ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ОБРОБКИ ВУГЛЕЦЕВМІСНОЇ СИРОВИНИ	24

15.	О. Віра, Ю. Еліяшевський ДІЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛУ DMAAS+Cr У НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНОМУ ДІАПАЗОНІ	25
16.	Св.Св. Гомон, С.С. Гомон, О.В. Петренко ДЕФОРМІВНІСТЬ ЛИСТЯНИХ ПОРІД ДЕРЕВИНИ РІЗНОГО ВІКУ	26
17.	R. Gumeniuk SUPERCONDUCTIVITY IN SOME PSEUDO-CAGE COMPOUNDS	27
18.	О. Т Дармонук., З. М. Шпирка, Н.В. Герман, В.В. Павлюк ПЕРЕПІЗИ CeGe₂-{Ho, Tb}Ge₂	28
19.	G. Dmytriv, V. Pavlyuk, H. Ehrenberg, A. Mar VALENCE ELECTRONS CONCENTRATION AND COLOR OF INTERMETALLIC PHASES	30
20.	Д.О. Іванюк, Л.В. Піскач, А.Г. Кевшин, Н.А. Кевшин ОСОБЛИВОСТІ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ПОЧЕТВЕРЕННОГО СЕЛЕНІДУ Tl₂CdGeSe₄	31
21.	I. A. Ivashchenko, L. D. Gulay, V.V. Halyan, L. Piskach, V.O. Yukchymchuk, K. Matras-Postolek NEW LUMINESCENCE MATERIALS BASED ON HALIDE DOUBLE PEROVSKITES	33
22.	I.V. Kalytovskii, O.Ya. Zelinska, V.M. Kordan, A.V. Zelinskiy, V.V. Pavlyuk LaNi₅ DOPPED WITH Zr, Mg AND Sn: SYNTHESIS, PHASE ANALYSIS AND ELECTROCHEMICAL HYDROGENATION	34
23.	О. Kapush, О. Ivakhno-Tsehelnik, О. Selyshchev, V.M. Dzhagan, N. Mazur, S. Kondratenko, V.V. Dzhahan, V. Yukhymchuk, M.Ya.Valakh, D.R.T. Zahn RAMAN SPECTROSCOPY OF Fe₃O₄ AND Fe₃O₄/Au NANOPARTICLES AT DIFFERENT EXCITATION WAVELENGTHS	35
24.	О. R. Karychort, N. Yu. Buriak, О. V. Zhak, Yu. M. Prots, Yu. M. Grin STUDY OF THE NOVEL TERNARY PHOSPHIDES BY SINGLE CRYSTAL METHOD	36
25.	A. Karnaukhov, О. Kapush, N. Mazur, О. Selyshchev, L.I. Trishchuk, S. Kondratenko, V. Yukhymchuk, M.Ya.Valakh, О. Ivakhno-Tsehelnik, V. Dzhagan, D.R.T. Zahn RAMAN SPECTROSCOPY STUDY OF Cu₂XSnS₄ (X = Fe, Ni, Zn) NANOCRYSTALS SYNTHESIZED BY MILD CHEMICAL ROUTE	37
26.	V. A. Karpyna, L. A. Myroniuk, D. V. Myroniuk, О. I. Olifan, О. F. Kolomys, V. V. Strelchuk, K. S. Naumenko, О. Yu. Povnitsa, L. O. Artiukh, I. Garmasheva, S. D. Zahorodnia, A. I. Ievtushenko PHYSICAL PROPERTIES, PHOTOCATALYTIC AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF DOPED ZNO NANOSTRUCTURES	38
27.	Н.А. Кевшин, А.А. Семенюк, А.Г. Кевшин ОСОБЛИВОСТІ ЗБУДЖЕННЯ ФОТОЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ В ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКЛАХ ЛЕГОВАНИХ ІОНАМИ Er³⁺	39
28.	Г.О. Князєва, С.А. Князєв, В.В. Субботіна, Д.О. Педченко ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОЇ ДІЇ СІРКОВІСНИХ РОЗЧИНІВ НА ВИСОКОЛЕГОВАНІ СТАЛІ І ПОКРИТТЯ НІТРИДУ ХРОМУ	40
29.	Yu.V. Koval, L.V. Yashchynskyy, S.A. Fedosov, D.A. Zakharchuk, L.I. Panasyuk, A.V. Skvortsova, I.O. Hutsol FEATURES OF STRUCTURAL INHOMOGENEITIES IN CADMIUM ANTIMONIDE MONOCRYSTALS	42

30. С.Й. Ковалишин, С.В. Мягkota, Р.С. Шевчук, О.М. Сукач, А. Дідух, А.С. Пушак, О.П. Кушнір, В.В. Пташник 44
СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМІНЕСЦЕНТНІ ВЛАСТИВОСТІ РІПАКОВОЇ ОЛІЇ, ОТРИМАНОЇ З НАСІННЯ, ОЧИЩЕНОГО ЕЛЕКТРОСТАТИЧНИМ ПОЛЕМ
31. А. Ковальчук, Л.І. Панасюк 45
ТЕНЗОРЕЗИСТИВНИЙ ЕФЕКТ В СИЛЬНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛАХ Р-КРЕМНІЮ
32. А.С. Коверя, А.С. Ковров, В.Я. Шемет, А.О. Овчаренко, К.О. Черданцева, К.В. Кириченко 47
ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКОЇ ЗЕМЛІ ПІСЛЯ ПАДІННЯ УДАРНОГО БЕЗПЛОТНОГО ЛІТАЛЬНОГО АПАРАТУ
33. В.М. Кордан, В.Т. Волошин, Тарасюк І.І., В.В. Нитка, О.І. Заремба., В.В. Павлюк 49
СИНТЕЗ ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ГІДРУВАННЯ КОМПОЗИТУ $Tb_2Ni_{17-x}Mg/Ca_{0.5}Dy_{0.5}MnO_3$
34. В.М. Кордан, Е.А. Мацько., І.І. Тарасюк, О.І. Заремба, В.В. Павлюк 51
ГІДРОГЕНСОРБЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИТУ НА ОСНОВІ $Y_2Ni_{17-x}Mg_x$ ТА ОКСИДНОЇ КЕРАМІКИ
35. А. Коржов, О. Смітюх, О. Марчук 54
КАТІОННЕ ТА АНІОННЕ ЗАМІЩЕННЯ У КРИСТАЛІЧНІЙ СТРУКТУРІ Pb_2GeS_4
36. A.A. Korchovy, K. Svezhentsova, A.A. Kryuchyn, I.V.Kosiak, V.V.Strelchuk, S.A. Kostyukevich, M.S. Boltovets, O.M. Kolesnikov, V.M. Dzhagan 55
LASERS-INDUCED MODIFICATIONS OF THE MATERIALS PROPERTIES FOR APPLICATION IN MASKLES LITHOGRAPHY
37. А.М. Красіцька, З.М. Шпирка, Н.В. Герман, В.М. Кордан, В.В. Павлюк 57
ЕЛЕКТРОХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ФАЗИ $Y_{5-x}Sm_xGe_3$
38. S.A. Lisovska, T.O. Lysiv, N.Ya. Ivanichok, R.V. Ilnytskyi, A.M. Soltys, B.I. Rachiy 60
PREPARATION AND SORPTION PROPERTIES OF NANOPOROUS CARBON MATERIALS
39. S.V. Luniov, M.V. Khvyshchun, V.T. Maslyuk 62
DEVELOPMENT OF RADIATION PROTECTIVE COATING BASED ON EPOXY COMPOSITE WITH IRON POWDER FILLER
40. M.I. Mannanov 63
MECHANICAL PROCESSING TECHNOLOGY IN THE MANUFACTURE OF SILICON-BASED TEMPERATURE SENSORS
41. О.В. Маркітан 64
ДОСЛІДЖЕННЯ АДСОРБЦІЇ НУКЛЕЇНОВОЇ КИСЛОТИ ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ
42. D. Maziar, O. Kolomys., V. Strelchuk, A. Nikolenko, M. Aliksandrov, Z. Tsybrii, Ye. Melezhyk, P. Lytvyn 65
ADVANCED ABSORPTIVE FREQUENCY-SELECTIVE REFLECTION STRUCTURES FOR ELECTROMAGNETIC SHIELDING AND HIGH-FREQUENCY WAVE ABSORPTION
43. О.А. Мікуліч, О.І. Гулай, Т.В. Фурс, В.Я. Шемет, О.В. Сад 68
МОРФОЛОГІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ ПІНОПОЛІУРЕТАНІВ, ОДЕРЖАНИХ СПОСОБОМ ЗАЛИВКИ

44. O.A. Mikulich, M.V. Deliaivskiy, N.M. Hamonin 69
NUMERICAL METHODS FOR ANALYZING STRESS-STRAIN STATE OF ORTHOTROPIC PLATES OF MEDIUM THICKNESS
45. O.A. Mikulich, D.K. Zaiakin 70
USE OF COMPUTER DATA ANALYSIS SYSTEMS FOR STUDYING STRUCTURAL HETEROGENEITY OF MATERIALS
46. І.А. Мороз, О.Р. Левкович 71
ВИСОКОЕФЕКТИВНІ СОРБЕНТИ НА ОСНОВІ КАБОВИХ ВІДХОДІВ
47. Г. П. Ничипорук, Д. Г. Димитриаді, Я.М. Каличак 73
СИНТЕЗ І КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $Tb_{26}Co_{6,4}In_{10,6}$
48. Ощеповська Н. В. 74
ПОЛІМЕРНІ МАТЕРІАЛИ ДЛЯ 3D ДРУКУ. ЇХ ВЛАСТИВОСТІ ТА ЗАСТОСУВАННЯ
49. Ю.М. Панчук, В.С. Довбенко, О.Ю. Дейнека 75
РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ МАЛОЦИКЛОВОЇ ВТОМЛЕНОСТІ ДРІБНОЗЕРНИСТОГО ТА КРУПНОЗЕРНИСТОГО БЕТОНІВ
50. О.В. Пахолук, О.І. Передрій 76
ВПЛИВ ПРАННЯ НА ВИДІЛЕННЯ МІКРОПЛАСТИКУ З ПОЛЕФІРНИХ ТКАНИН
51. О.Є. Поляк, В.М. Гунька 78
ФІЗИКО-МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ БІТУМУ, МОДИФІКОВАНОГО ПАР НА ОСНОВІ ВІДНОВЛЮВАНОЇ СИРОВИНИ
52. М. Попович, Г. Кочубей, К. Шпортько, О. Стронський, А. Лотник 79
СПЕКТРОСКОПІЯ КОМБІНАЦІЙНОГО РОЗСІЯННЯ ТА РЕНТГЕНОСТРУКТУРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ СПЛАВІВ GA-GE-TE
53. Н.В. Роїк, Л.О. Белякова 80
СИНТЕЗ ГІБРИДНОГО МАТЕРІАЛУ НА ОСНОВІ АМІНОКРЕМНЕЗЕМУ ТА МЕТАЛ-ОРГАНІЧНОГО КООРДИНАЦІЙНОГО ПОЛІМЕРУ
54. M.Ya. Rudysh, R.S. Brezvin, O.Yu. Khyzhun, V.Yo. Stadnyk, P.A. Shchepanskyi, M. Piasecki, N.M. Melnykova, A. Kotlov, A.S. Voloshinovskii, T.M. Pasitsky 81
ELECTRONIC STRUCTURE AND LUMINESCENCE OF POTASSIUM SULFATE CRYSTAL
55. М.Я. Рудиш, Р.С. Брезвін, Л.-Д. Т. Карплюк, А.О. Федорчук, А.І. Кашуба, В.М. Кордан, А.М. Ларченко 83
ЕЛЕКТРОННА БУДОВА І РЕФРАКТИВНІ ПАРАМЕТРИ КРИСТАЛА Na_2SO_4
56. О.Л. Садова, В.П. Кашицький, М.І. Вишинський 85
ВПЛИВ ПОПЕРЕДНЬОЇ ТЕРМІЧНОЇ ОБРОБКИ КОМПОЗИЦІЇ НА СТРУКТУРУВАННЯ БІОКОМПОЗИТІВ
57. Ya.A. Saidimov, R.F. Rumi, F.B. Umarov 87
RELEVANCE OF MODIFICATION OF MATERIALS FOR MODERN ELECTRONICS BY PROTON BEAMS
58. А.О. Селезень, Л.Д. Гулай, Л.В. Піскач 89
ПОЛІТЕРМІЧНІ ПЕРЕРІЗИ СИСТЕМИ $Tl_2Se-CdSe-SiSe_2$
59. В.О. Семенюк, Н.М. Кньовець, І. М. Савчук, О.С. Климович, Л.В. Піскач 91
ФІЗИКО-ХІМІЧНА ВЗАЄМОДІЯ У СИСТЕМАХ $AgC^{III}X_2 - Ag_8D^{IV}X_6$ (де $C^{III} - As, Sb, Bi, D^{IV} - Ge, Sn, X - S, Se$)

60. М.С. Сидорко, С.О. Палка, М.М. Яцишин, О.С. Тимошук 93
ДОСЛІДЖЕННЯ ОПТИЧНИХ СПЕКТРІВ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ CrO_4^{2-} ТА $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$
61. С. М. Синяткін, О.С. Пантелєєва 97
СИНТЕЗ, БУДОВА ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ПОЛІОКСОМЕТАЛАТНИХ АНІОНІВ Mo ТА W З КОФЕЇНІЄМ
62. О.В. Субботін, В.В. Білозеров, В.В. Субботіна, В.І. Бобров, І.А. Калініченко, Г.А. Федоренко 98
ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КОРОЗІЙНОЇ СТІЙКОСТІ АЛЮМІНІЄВИХ СПЛАВІВ МЕТОДОМ МІКРОДУГОВОГО ОКСИДУВАННЯ
63. О.В. Субботін, В.В. Білозеров, В.В. Субботіна, І.М. Колупаєв, С.А. Князєв, С.О. Фесюков 99
ЗАКОНОМІРНОСТІ МІКРОДУГОВОГО СИНТЕЗУ ОКСИДІВ НА АЛЮМІНІЄВИХ СПЛАВАХ
64. Т.В. Фурс, О.А. Мікуліч, О.І. Гулай, В.Я. Шемет, О.В. Сад 100
ТЕХНОЛОГІЧНІ ПАРАМЕТРИ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ ПІНОПОЛІУРЕТАНУ
65. L. Khomenkova, S. Ponomaryov, D. Khomenkov, O. Melnichuk, F. Gourbilleau 102
PHASE SEPARATION AND ELEMENTAL REDISTRIBUTION IN GERMANIUM-RICH HAFNIA FILMS STUDIED USING SCANNING AUGER ELECTRON MICROSCOPY
66. В.В. Титаренко 103
СТРУКТУРА ТА ВЛАСТИВОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ НІКЕЛЕВИХ ПОКРИТТІВ, ОТРИМАНИХ ПРОГРАМОВАНИМ ІМПУЛЬСНИМ СТРУМОМ
67. В.В. Ткач, М.В. Кушнір, Т.В. Морозова, М.Ж. Монтейру, І. О'Ніл де Маскареньяш Гайвау, Я.Г. Іванушко, А.О. да Сілва, П.І. Ягодинець, Ж.О. Кормош, О.В. Луганська, Ж.Р. Гарсія, Г.М. Поченчук, Ж.І. Феррау да Пайва Мартінш 105
ТЕОРЕТИЧНЕ ПОРІВНЯННЯ АНОДНОГО ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ ТА ВИЛУЧЕННЯ ДИБЕНЗОКСАЗЕПІНУ НА НАНОЧАСТИНКАХ КУПРУМ (II) СУЛЬФІДУ
68. Z. Tsybrii, F. Sizov, M. Vuichyk, K. Svezhentsova, O. Gudymenko, O. Kosulya, N. Dmytruk, M. Smolii, A. Shekera 106
THE INFLUENCE OF THE IMPLANTED IMPURITIES ON THE STRUCTURAL, OPTICAL, AND ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF HgCdTe EPITAXIAL LAYERS
69. О.В. Цісар, Л.П. Марушко, Л.В. Піскач 107
ОСОБЛИВОСТІ СКЛОУТВОРЕННЯ У СИСТЕМАХ $\text{Tl}_2\text{X}-\text{C}^{\text{III}}_2\text{X}_3-\text{GeX}_2$ ($\text{C}^{\text{III}} - \text{Ga, In}$; $\text{X} - \text{S, Se}$)
70. А.В. Чернов, В.П. Кашицький, О.Л. Садова 109
РОЗРОБКА МОДИФІКОВАНИХ ЕПОКСИКОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ З ПІДВИЩЕНОЮ СТІЙКІСТЮ ДО ДИНАМІЧНИХ НАВАНТАЖЕНЬ
71. Х.П. Чикеренда, С.А. Федосов 110
ОПТИЧНІ ЯВИЩА В АТМОСФЕРІ ЗЕМЛІ
72. K. Shportko, S. Cremer, A. Lotnyk 112
TAILORING THE CHEMICAL BONDING OF Sb_2Te_3 THIN FILMS
73. В. Юхимчук, О. Капуш, О. Гудименко, Н. Мазур, О. Оберемок, Т. Сабов, О. Дубіковський, В. Єфанов, О. Кульбачицький, О. Косуля, Б. Романюк 114
ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ GeSn ТА GeSn:C ПЛІВОК НА Si

ПІДКЛАДКАХ

74. Ю. В. Яворський, А.Б. Груб'як, О. І. Дудка 116
ВПЛИВ ТРИВАЛОСТІ МЕХАНІЧНОЇ ОБРОБКИ $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ НАНОКОМПОЗИТУ НА ПОТЕНЦІОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЛІТІЄВИХ АКУМУЛЯТОРІВ
75. O. Yakymchuk, O. Khyzhun, V. Bekenev, Y. Solonin 117
ELECTRONIC STRUCTURE OF CuWO_4 AND WO_{3-x} NANOCRYSTALS AS DETERMINED FROM X-RAY SPECTROSCOPY STUDIES AND FIRST-PRINCIPLES FP-LAPW BAND-STRUCTURE CALCULATIONS
76. Т.К. Яцинюк, В.В. Галян, І.А. Івашенко, А.Г. Кевшин, В. Артюх 119
СПЕКТРИ ПОГЛИНАННЯ СТЕКОЛ $\text{Ga}_2\text{S}_3\text{-GeS}_2\text{-Sb}_2\text{S}_3$ ЛЕГОВАНИХ Er та Nd

Секція 2. Новітні фізичні та хімічні методи дослідження і технології

1. О.Є. Беляєв, М.Я. Валах, І.П. Ворона, О.Й. Гудименко, В.Б. Лозинський, Ю.М. Насека, В.П. Темченко, П.М. Болтавець, В.О. Юхимчук 121
ФОРМУВАННЯ ТА ВЛАСТИВОСТІ ГІДРОКСИЛАПАТИТНИХ ПЛІВОК НА ТИТАНОВИХ ТА ПОЛІМЕРНИХ ПІДКЛАДКАХ
2. Б. Венгрин, Р. Буклів, А. Данилов, В. Гайдучок, І. Сенько, А. Андрущак 123
ВПЛИВ ПРОЦЕСІВ ТРАВЛЕННЯ ПОВЕРХНІ МЕХАНІЧНО ОБРОБЛЕНОГО МОНОКРИСТАЛІЧНОГО ГЕРМАНІЮ НА ФОТОМОДУЛЯЦІЮ СУБ-ТЕРАГЕРЦОВОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ
3. O.G. Golenkov, V.P. Reva, S.V. Korinets, A.V. Shevchik-Shekera, I.O. Lysiuk, V.V. Zabudsky, M.V. Vuichyk, M.Yu. Kovbasa, F.F. Sizov 124
DESIGN AND DEVELOPMENT OF LINEAR AND MATRIX ARRAYS BASED ON Si-MOSFET DETECTORS FOR ACTIVE TERAHERTZ IMAGING
4. N. Hulai, M. Zanella, C. M. Robertson, D. Ritchie, M. S. Dyer, L. M. Daniels, J. B. Claridge, M. J. Rosseinsky 126
NAVIGATION THROUGH HIGH-DIMENSIONAL CHEMICAL SPACE: DISCOVERY OF $\text{Ba}_5\text{Y}_{13}[\text{SiO}_4]_8\text{O}_{8.5}$ AND $\text{Ba}_3\text{Y}_2[\text{Si}_2\text{O}_7]_2$
5. В.Ю. Денисюк, М.О. Огородник 127
ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ВИКОРИСТАННЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ У ВИКОНАВЧИХ ПРИСТРОЯХ ДЛЯ МІКРОПЕРЕМІЩЕНЬ
6. В.Ю. Денисюк, О.Д. Кібиш 129
АНАЛІЗ ТЕХНОЛОГІЙ ЗАПИСУ ЗОБРАЖЕНЬ НА ТОНКИХ ПЛІВКАХ
7. G.V. Dorozinsky, A.V. Samoylov, V.V. Romanchuk, R.V. Khrystosenko, L.Yu. Khomenkova 131
IMPROVEMENT OF MEASUREMENT OF IMMOBILIZATION OF PROTEINS BY THERMAL STABILIZATION OF THE SPR-BASED SENSOR SYSTEM
8. С. Карпусь, Г. Коваленко, Ю. Казарінов, І. Шляхов, І. Семісалов, Т. Малихіна 133
ОСОБЛИВОСТІ ДОСЛІДЖЕННЯ ВЗАЄМОДІЇ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНИХ ПУЧКІВ ПРИСКОРЕНИХ ЕЛЕКТРОНІВ З АМОРФНИМИ ТА МОНОКРИСТАЛІЧНИМИ СТРУКТУРАМИ
9. О. Кульбачинський, В. Мельник, С. Сапон, О. Оберемок, О. Дубіковський, О. Косуля, З. Максименко, В. Коротеев, О. Сидор 134
ФОРМУВАННЯ ЛАВИННОГО ФОТОДІОДУ НА ОСНОВІ КРЕМНІЮ

10.	В.С. Рибальченко, Ю.П. Фещук, В.П. Кашицький ОПТИМІЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ ЕЛЕКТРОКОНТАКТНОГО ЗВАРЮВАННЯ ЛИСТІВ НИЗЬКОВУГЛЕЦЕВОЇ СТАЛІ	136
11.	Т.І. Савчук, С.І. Корольчук, Д.С. Гудим, Н.М. Цалковський ТЕРМІЧНИЙ АНАЛІЗ ЯК СПОСІБ ДОСЛІДЖЕННЯ СКЛАДУ ЙОННОГО АСОЦІАТУ	137
12.	В.Ю. Пуць, С.А. Федосов, Л.В. Ящинський, Д.А. Захарчук, Ю.В. Коваль МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ДОСЛІДЖЕННЯ ПОВЕДІНКИ У ПОВІТРІ ШТУЧНО ВВЕДЕНИХ НЕГАТИВНИХ ІОНІВ ХЛОРИДУ НАТРІЮ	139
13.	П.В. Сахнюк, А.М. Кубінський, Д.А. Шава, О.В. Замуруєва СТАБІЛЬНІСТЬ І НАДІЙНІСТЬ ТВЕРДОТІЛЬНИХ НАКОПИЧУВАЧІВ	141
14.	С. Свелеба, І. Катеринчук, І. Куньо, Н. Гвоздьов, Ю. Капчук ФРАКТАЛЬНІСТЬ НЕСПІВМІРНОЇ НАДСТРУКТУРИ В КРИСТАЛАХ $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$	142
15.	В.В. Ткач, М.В. Кушнір, Т.В. Морозова, М.Ж. Монтейру, І.О'Ніл де Маскареньяш Гайвау, Я.Г. Іванушко, А.О. да Сілва, П.І. Ягодинець, Ж.О. Кормош, О.В. Луганська, Ж.Р. Гарсія, Ж.І. Феррау да Пайва Мартінш МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС ЕЛЕКТРОХІМІЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ АНТИГЕЛЬМІНТНОГО ПРЕПАРАТУ АРТЕМІЗИНИН НА КАТОДІ, МОДИФІКОВАНОМУ ВАНАДІЙ (III) ОКСИГІДРОКСИДОМ	144
16.	О.П. Уманський, Н.П. Зайчук, С.П. Шимчук АНАЛІЗ ПОВЕРХНІ КОМПЛЕКСНОГО ЛАЗЕРНОГО ПОКРИТТЯ ПІСЛЯ ТЕПЛОВОГО ВПЛИВУ	145
17.	Ц. Цао, С.М. Левицький, О.В. Стронський ЛАЗЕРНО-СТИМУЛЬОВАНА МОДИФІКАЦІЯ НАПІВПРОВІДНИКІВ	147
18.	Ц. Цао, С.М. Левицький, О.В. Стронський АКУСТИЧНИЙ ВІДГУК В НАПІВПРОВІДНИКАХ ПРИ ЛАЗЕРНОМУ ОПРОМІНЕННІ	148
19.	Л.Л. Сартинська ЕЛЕКТРОМАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ КЕРАМІЧНИХ НАНОПОРОШКІВ	149

Секція 3. Проблемні питання твердотільної електроніки

1.	О.В. Балюк, Р.Ю. Гапончук, М.В. Бондарчук, О.В. Замуруєва ЗАСТОСУВАННЯ ЛЮМІНЕСЦЕНТНИХ ДЕТЕКТОРІВ У СФЕРІ РЕТРОСПЕКТИВНОЇ ДОЗИМЕТРІЇ	152
2.	V. Berardi QUANTUM SENSORS AND APPLICATIONS	153
3.	Вольська І., Федосов С.А. ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ТЕОРІЇ ХАОСУ ТА ЇЇ ЗАСТОСУВАННЯ В ЦИФРОВИХ ТЕХНОЛОГІЯХ	153
4.	А. Глушпенко, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук GPS: ПРИНЦИПИ РОБОТИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ ПРАКТИЧНОГО ЗАСТОСУВАННЯ	154
5.	О.І. Datsenko, С.В. Kondratenko, А.А. Pocherpailo, Р.О. Kovanzhi TEMPERATURE-DEPENDENT IMPEDANCE SPECTROSCOPY OF A GeSn FILM	156

6.	І. Доля, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук ФІЗИКА ТВЕРДОГО ТІЛА ЯК ВАЖЛИВА СКЛАДОВА ФІЗИЧНИХ ОСНОВ ІНФОРМАЦІЙНИХ СИСТЕМ	158
7.	В.С. Мороз, С.А. Федосов, Ю.В. Коваль ПРИНЦИП РОБОТИ І МОЖЛИВОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ 3D ПРИНТЕРА	159
8.	С.А. Мороз, В.Д. Чалий, А.А. Горайчук АНАЛІЗ ФУНКЦІЇ ПЕРЕТВОРЕННЯ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИХ ДАВАЧІВ	161
9.	О.О. Нижник, С.А. Федосов, Л.В. Ящинський ПЕРСПЕКТИВИ ВИКОРИСТАННЯ ГОЛОГРАФІЧНИХ МОНІТОРІВ	163
10.	Ю. Серьогін, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук КВАНТОВІ ОБЧИСЛЕННЯ	165
11.	Б. Троць, С.А. Федосов, Д.А. Захарчук ЗАСТОСУВАННЯ НАНОТЕХНОЛОГІЙ В ЕНЕРГЕТИЦІ: ПЕРЕВАГИ, ВИКЛИКИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ	167

Секція 4. Теоретичні та прикладні питання математичної фізики

1.	Н.М. Hubal MATHEMATICAL RESEARCH OF THE DYNAMICS OF THE ELECTRICAL POTENTIAL OF A NEURON	169
2.	Е. Vysochanska, Н. Ilchuk, А. Kashuba, І. Semkiv FIRST-PRINCIPLE CALCULATION OF THE STRUCTURE STABILITY OF 2D CDTE CLUSTERS	170
3.	А. Кульчицький, О. Семотюк РОЗРАХУНОК СПІВВІДНОШЕНЬ ВЕЛИЧИН ФОТОІНДУКОВАНОЇ АНІЗОТРОПІЇ У СМУГАХ ПОГЛИНАННЯ МА-ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ НА СКОЛАХ КРИСТАЛІВSRCL₂- ME⁺	172
4.	О.А. Снарський, І.М. Іванова, В.В. Федотов СПІВВІДНОШЕННЯ ВЗАЄМНОСТІ В ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ КОМПОЗИТАХ: ТРИВИМІРНИЙ ВИПАДОК	173
5.	Тимошук В.М., Гуда О.В., Потейчук М.І. СТІЙКІСТЬ РОЗВ'ЯЗКІВ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ РІВНЯНЬ ПРИ СИНХРОНІЗАЦІЇ ВІБРОЗБУДНИКІВ У ВІБРАЦІЙНИХ МАШИНАХ	175
6.	Р. Trokhimchuck, В. Fedik SOME PROBLEMS OF MODELLING THE RELAXED OPTICAL PROCESSES IN INDIUM ANTIMONITE AND INDIUM ARSENIDE	177
7.	Д.М. Шваліковський НЕРЕГУЛЯРНІ СІТКИ ДЛЯ ЗАДАЧ З ЦЕНТРАЛЬНОЮ СИМЕТРІЄЮ ПРИ ЧИСЛОВОМУ ІНТЕГРУВАННІ СПЕЦІАЛЬНИХ ФУНКЦІЙ	178
8.	П. Шигорін ГІДРОДИНАМІКА БОЗЕ-ГАЗУ ЗА НАЯВНОСТІ КОНДЕНСАТУ	179

- | | | |
|-----|---|-----|
| 9. | П. Шигорін, Д. Скорубський, К. Хаймик
РЕЗОНАНСНЕ ТУНЕЛЮВАННЯ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ | 182 |
| 10. | Л.О. Яворська, Л.І. Никируй
МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ МІЖДИФУЗНОГО ШАРУ
ТОНКОПЛІВКОВОГО СОНЯЧНОГО ЕЛЕМЕНТА НА ОСНОВІ
CdTe | 184 |

**Секція 5. Методологія навчання фундаментальних дисциплін у
вищій школі**

- | | | |
|----|--|-----|
| 1. | Т.В. Авдєєва, Т.Г. Чижська
НЕОБХІДНІСТЬ СТВОРЕННЯ ДОПОМІЖНИХ МАТЕРІАЛІВ
ОКРЕМИХ РОЗДІЛІВ МАТЕМАТИКИ ДЛЯ ВИКОРИСТАННЯ В
КУРСІ ФІЗИКИ | 185 |
| 2. | О.В. Bilenka, М.М. Romaniuk, I.V. Petrovych
USE OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE PLATFORMS IN HIGHER
EDUCATION | 187 |
| 3. | О.Б. Біленька, М.М. Романюк, І.В. Петрович
ВИКОРИСТАННЯ СМАРТФОНІВ ПРИ ВИКЛАДАННІ КУРСУ
ЗАГАЛЬНОЇ ФІЗИКИ | 188 |
| 4. | О.В. Гуда, Т.А. Крадінова
ЗАСТОСУВАННЯ ІНФОРМАЦІЙНО-КОМУНІКАЦІЙНИХ
ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ ФОРМУВАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ
КОМПЕТЕНТНОСТЕЙ | 190 |
| 5. | О.І. Гулай, М.О. Демчук
ТРАНСФОРМУВАННЯ ЗМІСТУ ОСВІТНІХ КОМПОНЕНТІВ У
STEM-НАПРЯМКАХ | 191 |
| 6. | І.А. Мороз
РОЗВИТОК КРИТИЧНОГО МИСЛЕННЯ ЯК КЛЮЧОВИЙ ФАКТОР
ЕФЕКТИВНОГО ВИКЛАДАННЯ ХІМІЧНИХ ДИСЦИПЛІН | 192 |
| 7. | М.В. Чорнобай, Н.А. Якимчук
ІPS МАТРИЦІ: АНАТОМІЯ ТА ФУНКЦІОНУВАННЯ | 194 |
| 8. | Г.П. Шаварова, А.Г. Кевшин
ПРАКТИКА НА ВИРОБНИЦТВІ ЯК ЗАСІБ ЗАЛУЧЕННЯ
СТУДЕНТІВ
ВИЩИХ НАВЧАЛЬНИХ ЗАКЛАДІВ ДО ВПРОВАДЖЕННЯ
ІННОВАЦІЙ НА ПІДПРИЄМСТВІ | 196 |
| 9. | В.І. Шпак, О.В. Новосад
ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ ПРИ
ВИВЧЕННІ РОЗДІЛУ «КОЛИВАННЯ І ХВИЛІ» У ЗЗСО | 197 |

МАТЕРІАЛИ VIII МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ
«ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА: СТАН, ДОСЯГНЕННЯ ТА ПЕРСПЕКТИВИ»

18-19 жовтня 2024 р.

ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА: СТАН, ДОСЯГНЕННЯ ТА
ПЕРСПЕКТИВИ: Матеріали VIII міжнародної науково-практичної конференції, 18-19
жовтня 2024 р., м. Луцьк. Луцьк: ІВВ НТУ, 2024. 208 с.

У збірнику представлені тези доповідей учасників конференції у авторській
редакції.

Підписано до друку 22.10.2024 р.
Формат 60x80/8. Папір офс. Ум. друк. арк. 22,0.
Тираж 100 прим. Зам.

Інформаційно-видавничий відділ
Луцького національного технічного університету
43018, м. Луцьк, вул. Львівська, 75.
Друк – ІВВ ЛНТУ
Свідоцтво Держкомтелерадіо України ДК №4123 від 28.07.2011 р