Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100325

Державний реєстраційний номер: 0118U000614

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Електронна структура, електричні, магнітні та X-променеві спектральні властивості нових потрійних сполук на основі d -і f - металів.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрям фінансування: 2.7 - інше

Джерела фінансування

7706 - безплатно (договір про науково-технічне співробітництво, тощо)

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Електронна структура, електричні, магнітні та Х-променеві спектральні властивості нових потрійних сполук на основі d -і f - металів

Назва роботи англійською:

Electronic structure, electric, magnetic and X-ray spectroscopic properties of the new ternary compounds on basic d- and f - metals

Реферат українською:

Актуальність зумовлена недостатньою вивченістю потрійних інтермета-лічних сполук з характерними резонансними явищами, які визначають перспек¬тивність їхнього використання у різних галузях техніки. Це вимагає виявлення взаємозв'язку фундаментальних закономірностей формування зонної структури сполук з основними параметрами валентного стану d – і f – елементів та їх фізичними характеристиками. У зв'язку з однозначним встановленням тонкої структури Х – променевих спектрів з електронною будовою твердих тіл високо¬енергетична спектроскопія стала одним з основних фізичних методів дослідже¬ння зонної структури складних сполук. Метою проекту є комплексне експериментальне і теоретичне дослідження атомної та електронної структури, електричних, магнітних та Х- променевих спектральних властивостей потрійних інтерметалічних сполук на основі d(f)- елементів. Об'єкт дослідження, це – фундаментальні закономірності формування електронно- енергетичного спектру нових потрійних інтерметалічних сполук систем: R.E. – M – X (R.E. – Sc, Y, La–Lu; M – 3d – перехідні метали; X – Si, P, Ga, Ge, Sn, Sb). Предметом дослідження були кореляційні залежності параметрів високоенергетичних спектрів потрійних сполук з резонансними ефектами та їх фізичними властивостями. Методами високоенергетичної спектроскопії встановлено структуру валентної зони та зони провідності. Методом LMTO розраховано їх зонну структуру та емісійні (абсорбційні) Х- променеві спектри. Методом Месбауерівської спектроскопії для ряду сполук встановлено природу їх магнетизму. Для сполук з валентно-нестабільними церієм, європієм та ітербієм методом LIII–спектроскопії встановлена температурна залежність валентності рідкісноземельних елементів.

Реферат англійською:

The relevance of the research topic is due to the insufficient study of ternary intermetallic compounds with characteristic resonant phenomena, which determine the prospects of their use in various fields of technology. This requires identifying the relationship of the fundamental laws of band structure formation with the basic parameters of the valence state of d - and f - elements and their physical characteristics. Due to the unambiguous establishment of the fine structure of X-ray spectra with the electronic structure of solids, high-energy spectroscopy has become one of the main physical methods for studying the band structure of complex compounds. The aim of the project is a comprehensive experimental and theoretical study of the atomic and electronic structure, electrical, magnetic and X-ray spectral properties of ternary intermetallic compounds based on d (f) - elements. The object of research is the fundamental laws of formation of the electron-energy spectrum of new ternary intermetallic compounds of systems: R.E. - M - X (R.E. - Sc, Y, La – Lu; M - 3d - transition metals; X - Si, P, Ga, Ge, Sn, Sb). The correlation dependences of the parameters of high-energy spectra of ternary compounds with resonant effects and their physical properties were the subject of the study. The structure of the valence band and the conduction band was established by high-energy spectroscopy methods. Their band structure and emission (absorption) X-ray spectra were calculated by the LMTO method. The nature of their magnetism was established for a number of compounds by the method of Mesbauer spectroscopy. For compounds with valence-unstable cerium, europium, and ytterbium, the temperature dependence of the valence of rare-earth elements has been established by LIII - spectroscopy.

Індекс УДК: 543.62, УДК 543.42(075.8)

Коди тематичних рубрик:31.19.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Щерба Іван Дмитрович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Електронна структура, електричні, магнітні та х-променеві спектральні властивості нових потрійних сполук на основі d –і f – металів

Назва НТП англійською: Electronic structure, electrical, magnetic and x-ray spectral properties of new ternary compounds based on d –i f - metals

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Матеріалознавство

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методами високоенергетичної спектроскопії встановлено структуру валентної зони та зони провідності потрійних інтерметалічних сполук на основі d(f)- елементів.. Методом LMTO розраховано їх зонну структуру та емісійні (абсорбційні) Х- променеві спектри. Методом Месбауерівської спектроскопії для ряду сполук встановлено природу їх магнетизму. Для сполук з валентно-нестабільними церієм, європієм та ітербієм методом LШ–спектроскопії встановлена температурна залежність валентності рідкісноземельних елементів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Shcherba I. D. High Energy – Spectroscopy of Compounds, INFU of Lviv, 2018. – 305 p.

Antonyak O. High-energy electronic excitations and radiation defects in SrCl2 crystals / O. Antonyak, Ya. Chornodolskyy, S. Syrotyuk, N. Gloskovska, R. Gamernyk // Materials Research Express, – 2017 – Vol. 4, No. 11. – P. 116306.

Chylii M. The influence of nanoparticle sizes on the X-ray excited luminescence intensity in YVO4:Eu / M. Chylii, T. Malyi, T. Demkiv, Y. Chornodolskyy, A. Vas'kiv, S. Syrotyuk, V. Vistovsky, A. Voloshinovskii // Journal of Physical Studies. – 2018. – Vol. 22, No. 1. – P. 1301.

Tsiumra V., Localized exciton luminescence in YVO4:Bi3+ / V. Tsiumra, A. Zhyshkovych, T. Malyi, Y. Chornodolskyy, V. Vistovskyy, S. Syrotyuk, Ya. Zhydachevskyy, A. Suchocki, A. Voloshinovskii // Optical Materials. – 2019. – Vol. 89. – P. 480-487.

Syrotyuk S.V., Electron energy band spectrum of CsPbBr3 and CsPbI3 crystals modified by spin-orbit interaction / S.V. Syrotyuk, Ya.M. Chornodolskyy, A.S. Voloshinovskii, Yu.V. Klysko // Journal of Physical Studies. – 2019. – Vol. 23, No. 2. – P. 2704(7p.).

Дендебера М.П., Вплив умов синтезу на люмінесцентно-кінетичні властивості колоїдних наночастинок CsPbBr3 / М.П. Дендебера, Я.М. Чорнодольський, А.В. Жишкович, В.М. Салапак, Н.Є. Мітіна, Р.В. Гамерник, В.В. Вістовський, А.С. Волошиновський // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2019. – Вип. 56. – С. 122-132.

Карнаушенко В.О. Електронна енергетична структура кристала LaF3:Ce /В.О. Карнаушенко, Я.М. Чорнодольський, С.В. Сиротюк, А.С. Волошиновський // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2019. – Вип. 56. – С. 133-139.

Dendebera M. Time resolved luminescence spectroscopy of CsPbBr3 single crystal / M. Dendebera, Ya. Chornodolskyy, R. Gamernyk, O. Antonyak, I. Pashuk, S. Myagkota, I. Gnilitskyi, V. Pankratov, V. Vistovskyy, V. Mykhaylyk, M. Grinberg, A. Voloshinovskii // Journal of Luminescence. – 2020. – V. 225. – P. 117346.

Shcherba I. Structural Study, Mössbauer Spectra and Electrical Properties of R5Fe6Sn18 (R = Tm, Lu) Compounds / I. Shcherba, L. Romaka, A. Skoblik, B. Kuzel, H. Noga, L. Bekenov, Yu. Stadnyk, P. Demchenko, A. Horyn //Acta Phys. Pol A. – 2019. –Vol. 136. – P. 158–163.

Shcherba I. D. Electronic Structure and X-ray Spectra of the Ce2ScSi2 Compound / I. D. Shcherba, V. N. Antonov, D. Uskokovic, L. V. Bekenov, H. Noga, M. V. Kovalska, Z. M. Shpyrka, V. A. Denys // Journal of Physical Studies. – 2020. – Vol. 24, № 4.

Zhak O. Ternary antimonides Ln2Pd9Sb3 (Ln = La, Ce, Nd, Pr, and Sm): crystal, electronic structure, and magnetic properties / O. Zhak, T. Zdorov, V. Levytskyy, V. Babizhetskyy, C. Zheng, O. Isnard // J. Alloys Compd. – 2020. – Vol. 815. – P. 152428.

Жак О. Кристалічна структура арсеніду HfNiAs / О. Жак // Праці НТШ. Хімічні науки. – 2018. – Т. LIII. – С. 24–30.

Zhak O. Single crystal structure study of the new ternary phosphide Re0.44-0.51Ni0.56-0.49P / O. Zhak // Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім. – 2019. – Вип. 60. Ч. 1. – С. 110–116.

Shcherba I. D. Electronic structure and X-ray spectroscopic properties of the HfFe2Si2 compound // I. D. Shcherba, V. N. Antonov, O. V. Zhak, M. V. Kovalska, L. V. Bekenov, H. Noga, D. Uskokovic, B. M. Yatcyk. – Journal of Physical Studies. – 2019. – Vol. 23. – No. 2. – 2301 (7 p.)

Жак О. Новий тернарний фосфід гафнію зі структурою типу Fe2P / О. Жак // Праці НТШ. Хімічні науки. – 2019. – Т. LVI. – С. 144–151.

Shved O. Zr-based nickel aluminides: Crystal structure and electronic properties / L.P. Salamakha, S.Mudry, P.F. Rogl, E. Bauer //Journal of Alloys and Compounds. – 2020. – Vol. 821. – P. 153326.

Kawamura Y. Filled skutterudite superconductor CaOs4 P12 prepared by high-pressure synthesis / S. Deminami, L. Salamakha, E. Bauer, P. Sekine // Physical Review B. – 2018. – Vol. 98(2). – P. 024513.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Мельник Володимир Петрович
д. філос. н.

Перелік осіб-виконавців

Жак Ольга Володимирівна
(к.х.н., 02.00.01)

Миколайчук Олексій Гордійович

Саламаха Леонід Петрович

Чорнодольський Ярослав Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів — Щерба І.Д.

Телефон — +38 (097) 370-32-35

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

