

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001783

Державний реєстраційний номер: 0121U108649

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Дослідження чутливості та залежності електрофізичних властивостей тонких плівок від агресивного середовища.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322582111

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 799.800
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Ефективні тонкоплівкові газові сенсори на основі сполук групи АІІВІ

Назва роботи англійською:

Effective thin-film gas sensors based on compounds of group АІІВІ

Реферат українською:

Відпрацьовано оптимальні режими осадження тонких плівок CdSe, CdS, ZnO та твердих розчинів заміщення ZnO:Al, CdSe_{1-x}S_x. Визначено залежність ширини забороненої зони від товщини плівки. Вперше, було оцінено електронно-оптичні параметри в рамках моделі вільних електронів Друде для плівок. Легування плівок оксиду цинку алюмінієм призводить до збільшення оптичної рухливості, часу релаксації та частоти плазми. Вперше оцінено залежність відношення густини носіїв до ефективної маси носія від товщини плівок CdSe. Вперше розраховано енергетичні спектри та оптичні параметри плівок CdSe_{1-x}S_x. Такі ж розрахунки були проведені і для випадку, коли плівки взаємодіють з газами CO, NO₂ та H₂. Взаємодія плівок CdSe_{1-x}S_x з CO газом впливає на ширину забороненої зони та параметр спин-орбітальне розщеплення. Найбільший вплив адсорбції CO на спин-орбітальне розщеплення виявлено для бінарної сполуки CdS (тобто концентрація $x=1$). Для усіх досліджуваних комплексів CdSe_{1-x}S_x у випадку взаємодії з H₂ бачимо тенденцію $E_g(\text{Se}+\text{H}_2) > E_g(\text{S}+\text{H}_2)$. Відмінності у значеннях ширини забороненої зони дозволяють використовувати тонкі плівки CdSe_{1-x}S_x в якості газових сенсорів. Найбільший вплив адсорбції NO₂ на оптичну щільність, встановлено для CdSe_{0.50}S_{0.50}. Абсолютне значення E_{ad} для CdSe_{0.75}S_{0.25} (для випадку, коли азот взаємодіє з сіркою) і CdSe є найбільшим. Величина розрахованих енергій адсорбції молекул демонструє наступну тенденцію $E_{ad}(\text{S}+\text{H}_2) > E_{ad}(\text{Se}+\text{H}_2)$. Розроблено технологію легування тонких плівок ZnO рідкоземельними елементами. Синтезовано та досліджено тонкі плівки ZnO:Re (Re= Cd+Cl; Cd+Eu+Cl; Er+Cl; Yb; Tb; Sm та Nd). Вперше було проведено дослідження спектрів низькочастотного відбиття для плівок ZnO:Re. Розроблено лабораторний зріз газного сенсора на основі досліджуваних зразків.

Реферат англійською:

Optimal modes of deposition of thin films of CdSe, CdS, ZnO and solid substitution solutions of ZnO:Al, CdSe_{1-x}S_x were worked out. The dependence of the band gap width on the film thickness was determined. For the first time, the electron-optical parameters were estimated within the framework of the Drude free electron model for films. Doping zinc oxide films with aluminum leads to an increase in optical mobility, relaxation time, and plasma frequency. For the first time, the dependence of the ratio of carrier density to the effective mass of the carrier on the thickness of the CdSe films was estimated. Energy spectra and optical parameters of CdSe_{1-x}S_x films were calculated for the first time. The same calculations were carried out for the case when the films interact with CO, NO₂ and H₂ gases. The interaction of CdSe_{1-x}S_x films with CO gas affects the band gap and the spin-orbit splitting parameter. The greatest effect of CO adsorption on spin-orbit splitting was found for the binary compound CdS (ie, concentration $x=1$). For all studied CdSe_{1-x}S_x complexes, in the case of interaction with H₂, we see the tendency $E_g(\text{Se}+\text{H}_2) > E_g(\text{S}+\text{H}_2)$. Differences in band gap values allow the use of CdSe_{1-x}S_x thin films as gas sensors. The greatest effect of NO₂ adsorption on the optical gap was found for CdSe_{0.50}S_{0.50}. The absolute value of E_{ad} for CdSe_{0.75}S_{0.25} (for the case where nitrogen interacts with sulfur) and CdSe is the largest. The value of the calculated adsorption energies of molecules shows the following trend $E_{ad}(\text{S}+\text{H}_2) > E_{ad}(\text{Se}+\text{H}_2)$. The technology of doping ZnO thin films with rare earth elements has been developed. ZnO:Re (Re= Cd+Cl; Cd+Eu+Cl; Er+Cl; Yb; Tb; Sm and Nd) thin films were synthesized and investigated. For the first time, a study of low-frequency reflection spectra for ZnO:Re films was conducted. A laboratory sample of the gas sensor was developed based on the tested materials.

Індекс УДК: 537.311.322, 621.315.562

Коди тематичних рубрик:29.19.31, 45.09.35

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кашуба Андрій Іванович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Тонкі плівки халькогенідів кадмію (CdX ($X = \text{S}, \text{Se}$) і твердих розчинів на їх основі) та оксидів металів (ZnO:X , $X = \text{Al}, \text{In}, \text{Ga}$).

Назва НТП англійською: Thin films of cadmium chalcogenides (CdX ($X = \text{S}, \text{Se}$) and solid solutions based on them) and metal oxides (ZnO: X , $X = \text{Al}, \text{In}, \text{Ga}$).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Основи технології одержання напівпровідникових плівок для створення газових сенсорів. Властивості напівпровідникових плівок халькогенідів кадмію та оксидів металів в середовищах різного роду газів.

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Осаджено тонкі плівки CdSe , CdS та твердих розчинів $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ та ZnO:Al та проведено дослідження якості плівок рентгеноструктурним методом. Тонкі напівпровідникові плівки CdS , CdSe , $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ та легованого ZnO характеризуються рівномірним розподілом зерен сполуки по всій площині підкладки. При взаємодії плівок $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ з CO газом ширина забороненої зони збільшується, її залежність від концентрації сірки змінюється з квадратичної на лінійну, а спин-орбітальне розщеплення зменшується. Енергія адсорбції CO на поверхні $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ має негативне значення, тобто процес адсорбції екзотермічний, що є найбільш енергетично вигідним в $\text{CdSe}_{0.25}\text{S}_{0.75}$. При взаємодії $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ з H_2 спостерігаємо відмінність у значеннях ширини забороненої зони ($E_g(\text{Se}+\text{H}_2) > E_g(\text{S}+\text{H}_2)$), що свідчить про перспективу використання матеріалу в якості газових сенсорів. При взаємодії $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ з NO_2 спостерігаємо зсув рівня Фермі в зону провідності. Найбільший вплив адсорбції NO_2 на ширину забороненої зони спостерігається для $\text{CdSe}_{0.50}\text{S}_{0.50}$. Значення енергії адсорбції для $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ є додатнім (процес ендотермічний). Для всіх зразків в випадках взаємодії H_2 і NO_2 абсолютні значення енергій адсорбції перевищують 1 еВ. Легування плівок оксиду цинку алюмінієм призводить до збільшення оптичної рухливості, часу релаксації та частоти плазми. Проведені дослідження спектрів низькочастотного відбиття (в області 20–600 cm^{-1} за кімнатної температури) для синтезованих тонких плівок ZnO:Re ($\text{Re} = \text{Cd}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Tb}, \text{Er}, \text{Yb}$) показали, що у спостережуваному спектральному діапазоні вимірювання можуть мати місце внутрішньоіонні електронні збудження рідкоземельних компонентів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Оптимізація параметрів шарів напівпровідникових сполук групи АІІВІ для використання при створенні експериментального зразка газового сенсора.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Результати роботи використані у навчальному процесі, на стадії впровадження на виробництві

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ТОВ “Стамар-Крокус”, ТОВ “Італгаз”, ТОВ “РЕНОМЕ”, “Науково-дослідний Інститут мікроприладів” НАН України, Науково-виробниче підприємство “Електрон-Карат”

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Демидов Іван Васильович

Д. Т. Н.

Перелік осіб-виконавців

Іващишин Федір Олегович

(Д. Т. Н.)

Ващинський Віталій Михайлович

(К. Ф.-м. Н.)

Гумінілович Руслана Ростиславівна

(К. Х. Н.)

Дзіковський Віктор Євгенович

Кашуба Наталія Юріївна

Коваленко Марія Василівна

(К. Ф.-м. Н.)

Куньо Василь Михайлович

Малий Тарас Сергійович

(К. Ф.-м. Н.)

Першина Софія Альбертівна

Рудиш Мирон Ярославович

(К. Ф.-м. Н.)

Семків Ігор Володимирович

(К. Т. Н.)

Сторожук Ярослав Михайлович

Шишковський Сергій Вікторович

(К. Е. Н.)

Щепанський Павло Андрійович

(К. Ф.-м. Н.)

Відповідальний за підготовку

Рибалкіна І.Б.

облікових документів

Телефон

+38 (032) 258-27-46

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

