Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100850

Державний реєстраційний номер: 0117U002303

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Побудова фазових діаграм квазіпотрійних систем на базі бінарних халькогенідів та галогенідів і розробка наближених до оптимальних умов синтезу, одержання монокристалів знайдених тетрарних фаз, а також вивчення їх кристалічної та електронної структури, властивостей і встановлення основних галузей використання

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: пр. Волі, 13, м. Луцьк, Луцький р-н., Волинська обл., 43025, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0332241007

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 6000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові складні халькогеніди та галогеніди для нелінійної оптики, термо- та оптоелектроніки: синтез, структура і властивості

Назва роботи англійською:

New complex chalcogenides and halides for non-linear optics, thermo- and optoelectronics: synthesis, structure and properties

Реферат українською:

Вперше досліджено і побудовано діаграми стану систем PbS(Se)–Ga2S(Se)3–GeS(Se)2, в яких підтверджено утворення сполук: PbGa2GeSe6 і виявлено прогнозовану нами сполуку PbGa2GeS6. Вперше встановлено кристалічну структуру PbGa2GeS6 (нецентросиметрична ПГ Fdd2) та одержано її кристали у розмірах, достатніх для проведення фізичних вимірювань. Встановлено зонну структуру PbGa2GeS6, її оптичні параметри (Eg, область прозорості), а також генерацію другої та третьої гармонік. Встановлено інконґруентний тип утворення для α-фаз, що існує між складами Pb4Ga4GeS(Se)12-Pb3Ga2GeS(Se)8. Методом Бріджмена-Стокбаргера одержано кристали PbGa2GeSe6, Pb2GeS4. Методами РФС та РЕС вивчено електронну структуру сполук PbGa2GeS6, PbGa2S4, PbGa2S5, Pb2GeS4 та PbGa6Te10, HgGa2Se4. Вперше побудовані діаграми фазових рівноваг систем PbGa2S(Se)4–SiS(Se)2, що характеризуються утворенням сполук еквімолярного складу PbGa2Si(Ge)X6. Вперше досліджено фазові рівноваги в системах TlGaS2–Zn(Cd,Hg)S і TlGaSe2–Zn(Cd, Hg, Fe)Se Ці системи є евтектичного типу із незначною розчинністю на основі компонентів. Вперше одержано кристали TlGa(In)S2:Zn2+(Cd2+,Hg2+) і TlGaSe2:Zn2+(Cd2+,Hg2+). Побудовано політермічні перерізи Cu2ZnGeS4-Cu2ZnSiS4, Cu2ZnGeS4-Cu2ZnSnS4, Cu2ZnSnS4-Cu2ZnSiS4, Cu2ZnGeSe4-Cu2ZnSnSe4, Cu2ZnGeSe4-Cu2ZnSiSe4, Cu2ZnSnS4-Cu2ZnSiSe4, Cu2ZnGeSe4–Cu2CdGeSe4. Системи характеризуються утворенням широких областей твердофазної розчинності на основі вихідних сполук аж до утворення НРТР. Побудовано діаграми стану квазібінарних систем TlPb2Cl(Br)5 – MPb2Cl(Br)5 (M = K, Rb). Досліджені системи є евтектичного типу. Методом Бріджмена-Стокбаргера вирощено монокристал фази K0,45Tl0,55Pb2Br5 високої оптичної якості та розшифровано її кристалічну структуру в ПГ P21/c. Вперше одержано кристали AgGaGe3Se8:Lu3+, Er3+, Nd3+, (1-x)AgGaGeS4–xAgGaGe3Se8 (x=0.4, 0.6), для яких вивчено термоелектричні, оптичні та фотоелектричні властивості.

Реферат англійською:

The state diagrams of the PbS (Se) –Ga2S (Se) 3 – GeS (Se) 2 systems were first investigated and constructed, in which the formation of the compounds: PbGa2GeSe6 was confirmed and the PbGa2GeS6 compound predicted was revealed. For the first time, the crystal structure of PbGa2GeS6 (noncentrosymmetric PG Fdd2) was established and its crystals were obtained in sizes sufficient for physical measurements. The band structure of PbGa2GeS6, its optical parameters (Eg, transparency region), as well as the generation of the second and third harmonics are established. An incongruent type of formation for the фa-phases existing between the compositions of Pb4Ga4GeS (Se) 12-Pb3Ga2GeS (Se) 8 is established. The Bridgman-Stockbarger method obtained PbGa2GeSe6, Pb2GeS4 crystals. The electronic structure of PbGa2GeS6, PbGa2S4, PbGa2S5, Pb2GeS4, and PbGa6Te10, HgGa2Se4 compounds has been studied by RF and PES methods. The phase equilibrium diagrams of PbGa2S (Se) 4 – SiS (Se) 2 systems, characterized by the formation of compounds of the equimolar composition of PbGa2Si (Ge) X6, were first constructed. Phase equilibria were first investigated in TlGaS2 – Zn (Cd, Hg) S and TlGaSe2 – Zn (Cd, Hg, Fe) Se systems. These systems are eutectic in type with little solubility based on components. For the first time, crystals of TlGa (In) S2: Zn2 + (Cd2 +, Hg2 +) and TlGaSe2: Zn2 + (Cd2 +, Hg2 +) were obtained.

Індекс УДК: 535.37, 548.55:546.22/24:535.37

Коди тематичних рубрик:29.31.23

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Кристали PbGa2GeS6

Назва НТП англійською: PbGa2GeS6 crystals

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Вища освіта, матеріалознавство

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Кристали PbGa2GeS6 є новим нелінійнооптичним матеріалом ближньої ІЧ-області, що переважає за своїми парамерами □-BiB3O6, яка має рекордні показники генерації другої гармоніки (ГДГ) для 1064 нм. Властивості PbGa2GeS6 для середньої ІЧ-області ще не досліджувались, проте область його прозорості охоплює широкий спектральний діапазон, що дозволяє надіятись на перспективність його властивостей і для нього. Цікавими для НЛО застосування є і вперше одержані кристали селеновмісного аналога PbGa2GeSe6, ефективність ГДГ якого вдвічі більша за показники комерційного AgGaS2. В тренді сучасного світового рівня дослідження НЛО-матеріалів є і вирощені нами кристали AgGaGe3Se8:Lu3+(Er3+,Nd3+) та (1-x)AgGaGeS4–xAgGaGe3Se8 (x=0, 0.4, 0.5, 0.6, 1). Вони цікаві більшою стійкістю до дії лазерного випромінювання (2-3 рази) за AgGaS2. Тверді розчини значної протяжності на основі тетрарних сполук родини кестеритів Cu2Zn/CdDIVSe4 дозволяють розширити діапазон досліджень нових матеріалів для поглинаючого шару тонкоплівкових сонячних елементів. Компоненти перерізів Tl4HgI6–Tl6SI4 і Tl4HgI6–Tl6SeI4 характеризуються високими значення добутку □□e і □□h (Tl4HgI6 – □□e=10-4 см2/В, Tl6SeI4 – □□e=7·10–3 см2/В, □□h=6·10–4 см2/В, Tl6SI4 – □□e=2.1·10–3 см2/В, □□h=2.3·10–5 см2/В), які перевищують показники класичних PbI2, HgI2, BiI3 і досягають рекордні значення Cd1-xZnxTe, проте є економічні релевантніші за нього. Перерізи Tl4HgI6–Tl6SI4 і Tl4HgI6–Tl6SeI4 характеризуються необмеженою розчинністю в твердому стані, тобто дозволяють одержувати ряд речовин із плавною зміною параметрів, що є перспективним для пошуку нових матеріалів для детекторів іонізуючого випромінювання.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Збільшення обсягів виробництва, Економія енергоресурсів, Науково-технологічне забезпечення оборонного комплексу України

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції: науковці, аспіранти, суб'єкти господарювання державного та приватного секторів

Перспективні ринки: Ринок наукових високотехнологічних послуг

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування:Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Матеріали для сонячної енергетики в системі CuGa, CuIn, Cd || S, Se / Парасюк О.В., Лавринюк З.В., Марушко Л.П., Піскач Л.В., Джам О.А. - Луцьк: ВНУ імені Лесі Українки, 2018. – 101 с. 2. Anatolii Fedorchuk, Yuri Grin Crystal Structure and Chemical Bonding in Gallides of Rare-Earth Metals / Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths Volume 53, 2018, Pages 81-143 3. T. Vu, A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, O.V. Parasyuk, V.A. Ocheretova, O.Y. Khyzhun, Electronic structure and optica

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Коцан Ігор Ярославович
д. б. н., 03.00.13

Перелік осіб-виконавців

Іващенко Інна Алімівна

Галян Володимир Володимирович
(к. ф.-м. н.)

Замуруєва Оксана Валеріївна
(к. ф.-м. н.)

Кадикало Елла Максимівна
(к. х. н.)

Кевшин Андрій Григорович
(к. ф.-м. н.)

Когут Юрій Миколайович

Козер Василь Ростиславович
(к. х. н.)

Коровицький Андрій Михайлович
(к. ф.-м. н.)

Кітик Іван Васильович
(д. ф.-м. н.)

Левковець Сергій Іванович

Марушко Лариса Петрівна
(к. х. н.)

Марчук Олег Васильович
(к. х. н.)

Мирончук Галина Леонідівна
(д. ф.-м. н.)

Мозолюк Марія Юріївна
(к. х. н.)

Новосад Олексій Володимирович
(к. ф.-м. н.)

Олексеюк Іван Дмитрович
(д. х. н.)

Панкевич Володимир Зіновійович
(к. ф.-м. н.)

Парасюк Олег Васильович
(к. х. н.)

Пясецький Міхал Войцех
(д. ф.-м. н.)

Піскач Людмила Василівна
(к. х. н., 02.00.01)

Рудиш Мирон Ярославович
(к. ф.-м. н.)

Сливка Наталія Юріївна
(к. х. н.)

Строк Оксана Мар'янівна
(к. х. н.)

Тищенко Петро Васильович
(к. х. н.)

Федорчук Анатолій Олександрович
(д. х. н.)

Федосов Сергій Анатолійович
(д. ф.-м. н.)

Хижун Олег Юліанович
(д. ф.-м. н.)

Цісар Оксана Володимирівна
(к. х. н.)

Шаварова Ганна Петрівна
(к. ф.-м. н.)

Юрченко Оксана Миколаївна
(к. х. н.)

Янчук Олександр Миколайович
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Глова Ірина Василівна

Телефон +38 (099) 338-49-03

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

