

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100092

Державний реєстраційний номер: 0117U000380

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Нові функціональні матеріали в системах Al,III-BIV,V-Se (Al,III-Tl,Cu,Ag,In, BIV,V-Sn,Pb,Sb,Bi): фазові діаграми, технологія, властивості.

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380312613321, 380312613396

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

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.): 1500

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові функціональні матеріали в системах Al,III-BIV,V-Se (Al,III-Tl,Cu,Ag,In, BIV,V-Sn,Pb,Sb,Bi): фазові діаграми, технологія, властивості.

Назва роботи англійською:

New functional materials in the Al,III-BIV,V-Se (Al,III-Tl,Cu,Ag,In,BIV,V-Sn,Pb,Sb,Bi) systems: phase diagrams, technology, properties.

Реферат українською:

Уперше досліджено фазові рівноваги у системах Tl-Sn(Pb,Sb,Bi)-Se, Tl₂Se-In₂(Sb₂)Se₃-“P₂Se₄”, визначено області гомогенності вихідних бінарних і проміжних тернарних сполук, встановлено координати нонваріантних подвійних і потрійних процесів. Досліджено природу та механізми утворення твердих розчинів на основі складних селенідів. Проведено кристалохімічний аналіз проміжних тернарних та тетрарних сполук та твердих розчинів на їх основі, вивчено зміну типу хімічних зв'язків, що дає можливість встановити закономірності «сполука – кристалічна структура – властивості». Уперше розроблені технологічні умови синтезу та вирощування якісних моно- (індивідуальні сполуки) та полікристалічних (тверді розчини та евтектичні композиції) зразків, для яких досліджено термоелектричні та оптичні властивості. Показано, що сполуки TlInP₂Se₆, In₄(P₂Se₆)₃, Tl₄P₂Se₆ можуть використовуватись в якості переносників заряду у сонячних панелях. Проведена оптимізація складів та методів одержання термоелектричних матеріалів дозволила виявити найбільш перспективні для використання в якості робочих елементів термоелектричних пристроїв взірці індивідуальної сполуки Tl₉BiSe₆ ($ZT_{\max}=(1.5:3.3)\times 10^{-3}$ K⁻¹), композитних сплавів на основі твердих розчинів (Tl₂Se)_{0.899}(Bi₂Se₃)_{0.101} ($ZT_{\max}=2.4\times 10^{-3}$ K⁻¹), (Tl₉BiSe₆)_{0.995}(Tl₄SnSe₄)_{0.005} ($ZT_{\max}=(1.9:2.9)\times 10^{-3}$ K⁻¹), евтектичних композицій (SnSe₂)_{0.55}(TlBiSe₂)_{0.45} ($ZT_{\max}=(1.5:2.6)\times 10^{-3}$ K⁻¹), (Tl₄SnSe₄)_{0.76}(Tl₉BiSe₆)_{0.13}(TlBiSe₂)_{0.11} ($ZT_{\max}=1.9\times 10^{-3}$ K⁻¹) і (Tl₄SnSe₄)_{0.85}(Tl₉BiSe₆)_{0.15} ($ZT_{\max}=1.5\times 10^{-3}$ K⁻¹) (одержано 6 патенти України №№ 111241, 120279, 105409, 113556, 24333/3A/17, а201808806), які за максимальними значеннями термоелектричної добротності переважають відомі халькогенідні термоелектричні матеріали на основі Bi₂Te₃ і PbTe.

Реферат англійською:

Phase equilibria in the Tl-Sn(Pb,Sb,Bi)-Se, Tl₂Se-In₂(Sb₂)Se₃-“P₂Se₄” systems were investigated for the first time, the homogeneity regions of the initial binary and intermediate ternary compounds were determined, the coordinates of nonvariant binary and ternary processes were determined. The mechanisms of formation of solid solutions based on complex selenides are investigated. The crystal-chemical analysis of the intermediate ternary and quaternary compounds and the solid solutions based on them were performed; the change of the type of chemical bonds was studied, which made it possible to establish regularities of the "compound - crystalline structure - properties". The technological conditions for the synthesis and cultivation of quality mono- (individual compounds) and polycrystalline (solid solutions and eutectic compositions) samples for which thermoelectric and optical properties have been investigated have been developed for the first time. It has been shown that the TlInP₂Se₆, In₄(P₂Se₆)₃, Tl₄P₂Se₆ compounds can be used as charge carriers in solar panels. The optimization of the compositions and methods of obtaining thermoelectric materials made it possible to identify the most promising models of the individual Tl₉BiSe₆ compound ($ZT_{\max}=(1.5:3.3)\times 10^{-3}$ K⁻¹), composite alloys based on solid solutions (Tl₂Se)_{0.899}(Bi₂Se₃)_{0.101} ($ZT_{\max}=2.4\times 10^{-3}$ K⁻¹) and (Tl₉BiSe₆)_{0.995}(Tl₄SnSe₄)_{0.005} ($ZT_{\max}=(1.9:2.9)\times 10^{-3}$ K⁻¹), eutectic compositions (SnSe₂)_{0.55}(TlBiSe₂)_{0.45} ($ZT_{\max}=(1.5:2.6)\times 10^{-3}$ K⁻¹), (Tl₄SnSe₄)_{0.76}(Tl₉BiSe₆)_{0.13}(TlBiSe₂)_{0.11} ($ZT_{\max}=1.9\times 10^{-3}$ K⁻¹) and (Tl₄SnSe₄)_{0.85}(Tl₉BiSe₆)_{0.15} ($ZT_{\max}=1.5\times 10^{-3}$ K⁻¹) (6 patents of Ukraine No. 111241, 120279, 105409, 113556, 24333/3A/17, а201808806 received), which are dominated by known chalcogenide thermoelectric materials based on Bi₂Te₃ and PbTe by maximum values of

figure of merit.

Індекс УДК: 546, 546.03::546.06+544.015.3[546.683/.56/.57/.682/.81/.86/.87/.23]

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Барчій Ігор Євгенович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Перспективні термоелектричні та оптичні матеріали на основі композитів (індивідуальні сполуки, тверді розчини, евтектичні суміші) у системах Al,III–BIV,V–Se (Al,III–Tl,Cu,Ag,In, BIV,V–Sn,Pb,Sb,Bi)

Назва НТП англійською: Perspective thermoelectric and optical materials based on composites (individual compounds, solid solutions, eutectic mixtures) in Al,III–BIV,V–Se (Al,III–Tl,Cu,Ag,In, BIV,V–Sn,Pb,Sb,Bi) systems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: 1 02.00.01 неорганічна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Уперше досліджено фазові рівноваги у системах Tl–Sn(Pb,Sb,Bi)–Se, Tl₂Se–In₂(Sb₂)Se₃–“P₂Se₄”, визначено області гомогенності вихідних бінарних і проміжних тернарних сполук, встановлено координати нонваріантних подвійних і потрійних процесів. Досліджено природу та механізми утворення твердих розчинів на основі складних селенідів. Проведено кристалохімічний аналіз проміжних тернарних та тетрарних сполук та твердих розчинів на їх основі, вивчено зміну типу хімічних зв'язків, що дає можливість встановити закономірності «сполука – кристалічна структура – властивості». Уперше розроблені технологічні умови синтезу та вирощування якісних моно- (індивідуальні сполуки) та полікристалічних (тверді розчини та евтектичні композиції) зразків, для яких досліджено термоелектричні та оптичні властивості. Показано, що сполуки TlInP₂Se₆, In₄(P₂Se₆)₃, Tl₄P₂Se₆ можуть використовуватись в якості переносників заряду у сонячних панелях. Проведена оптимізація складів та методів одержання термоелектричних матеріалів дозволила виявити найбільш перспективні для використання в якості робочих елементів термоелектричних пристроїв взірці індивідуальної сполуки Tl₉BiSe₆ ($ZT_{\max}=(1.5:3.3)\times 10^{-3}$ K⁻¹), композитних сплавів на основі твердих розчинів (Tl₂Se)_{0.899}(Bi₂Se₃)_{0.101} ($ZT_{\max}=2.4\times 10^{-3}$ K⁻¹), (Tl₉BiSe₆)_{0.995}(Tl₄SnSe₄)_{0.005} ($ZT_{\max}=(1.9:2.9)\times 10^{-3}$ K⁻¹), евтектичних композицій (SnSe₂)_{0.55}(TlBiSe₂)_{0.45} ($ZT_{\max}=(1.5:2.6)\times 10^{-3}$ K⁻¹), (Tl₄SnSe₄)_{0.76}(Tl₉BiSe₆)_{0.13}(TlBiSe₂)_{0.11} ($ZT_{\max}=1.9\times 10^{-3}$ K⁻¹) і (Tl₄SnSe₄)_{0.85}(Tl₉BiSe₆)_{0.15} ($ZT_{\max}=1.5\times 10^{-3}$ K⁻¹) (одержано 6 патенти України №№ 111241, 120279, 105409, 113556, 24333/3А/17, а201808806), які за максимальними значеннями термоелектричної добротності переважають відомі халькогенідні термоелектричні матеріали на основі Bi₂Te₃ і PbTe

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: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Liubachko V., Oleaga A., Salazar A., Kohutych A., Glukhov K., Pogodin A., Vysochanskii Yu. (2019). Thermal diffusivity and thermal conductivity in layered ferrielectric materials $M_1M_3P_2(S,Se)_6$ ($M_1 = Cu, Ag$; $M_3 = In, Bi$). Phase Transitions, 92, №5, 494-499. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/01411594.2018.1550640>
3. Sidey V. (2019). A simplified empirical model for predicting the lattice parameters for the cubic perovskite-related inorganic A_2BX_6 halides. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 126: 310-313. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022369718318298>
5. Barchii I.E., Tats'kar A.R., Fedorchuk A.A., Pogodin A.I., Solomon A.M. (2018). Phase Equilibria in the System $Tl_9SbSe_6-TlSbSe_2-Tl_4SnSe_4$. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 63(1), 104-110. <https://link.springer.com/article/10.1134/S0036023618010035>
6. Barchii I.E., Tovt V. A., Piasecki M., Fedorchuk A.A., Solomon A. M., Pogodin A.I. (2018). Physicochemical Interaction in the $TlInSe_2-TlInP_2Se_6$ System. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 63(4), 537-542. <https://link.springer.com/article/10.1134/S0036023618040034>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Студеняк Ігор Петрович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Барчій Ігор Євгенович

(д. х. н.)

Малаховська Тетяна Олександрівна

(к. х. н.)

Погодін Артем Ігорович

(к.х.н.)

Сабов Вікторія Іванівна

Сабов Мар'ян Юрійович

(к.х.н., 02.00.01)

Сідей Василь Іванович

(к.х.н., 02.00.01)

Філеп Михайло Йосипович

(к. х. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Фречка Н.І.

Телефон

+38 (050) 148-61-31

Реєстратор

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

