# Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0222U005264

**Державний реєстраційний номер:** 0119U001192

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 27-12-2022

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Фізико-хімічне дослідження квазіпотрійних систем на основі бінарних халькогенідів талію/аргентуму/ та елементів II, III та IV груп

**Початок етапу:** 01.2019

**Закінчення етапу:** 12.2021

**Вид звітного документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

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

**Код за ЄДРПОУ:** 02125102

**Місцезнаходження:** проспект Волі, буд. 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:** 380332720127, 380332241007

## 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, 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.):** 1440.000 |

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Синтез, структура та властивості нових тетрарних халькогенідів для термо- та оптоелектроніки

### Назва роботи англійською:

Synthesis, structure and properties of new tetrachloric chalcogenides for thermo- and optoelectronics

### Реферат українською:

Методом порошкової рентгенівської дифракції досліджено два ізотермічні перерізи систем Tl2Se–CdSe–Ge(Sn)Se2 при 570 K. Було підтверджено існування сполуки Tl2CdSnSe4. Вперше проведено успішний синтез монокристала Tl2CdSnSe4. Вперше встановлено утворення нових почетверенних сполук Tl2CdGe3Se8 і трьох ізоструктурних халькогенідів Tl2CdGeSe4, Tl2CdSiTe4, Tl2HgSiTe4. Склад Tl2CdGe3Se8 підтверджено SEM та EDS. Визначено кристалічну структуру сполук типу Tl2BIIDIVX4. Виконано комплексне експериментальне та теоретичне дослідження електронних властивостей та оптичних констант. Отримані експериментальні XPS-вимірювання поверхні кристала Tl2CdSnSe4, Tl2HgSnS4 опроміненої Ar+-іонами середньої енергії, і дані теоретичних розрахунків DFT показують, що, незважаючи на досить небезпечні складові хімічні елементи, талій і кадмій, поверхня кристала є досить стабільна і в поєднанні з відповідною шириною забороненої зони робить досліджуваний почетверенний селенід дуже перспективним напівпровідником для використання в тонкоплівкових сонячних елементах і оптоелектроніці, а також у високоефективних фотокаталітичних пристроях. Методами фізико-хімічного аналізу проведено дослідження ряду квазіпотрійних систем типу Tl2Se–Ga(In)2Se3–SnSe2 та побудовано їх ізотермічні перерізи при 520 K в повному концентраційному інтервалі. Встановлено існування 2 нових сполук Tl2Ga2SnSe6 і Tl5,6InSn6,7S17,6. Встановлено, що досліджувані кристали є фоточутливими матеріалами, що дозволяє використовувати дані кристали для розробки фоторезисторів, фотодіодів та інших приладів оптоелектроніки. Були синтезовані два нових селеніди Tl2Ga2SnSe6 й Tl2Ga2GeSe6. Дослідження НЛО властивостей третього порядку показали, що генерація третьої гармоніки чутлива для зовнішнього фотоіндукуючого опромінення. Таким чином, спостерігається рідкісна можливість модулювати інтенсивність сигналу ГТГ, що дозволяє розглядати ці сполуки як новий тип нелінійно-оптичних лазерних модуляторів.

### Реферат англійською:

Two isothermal cross-sections of the Tl2Se–CdSe–Ge(Sn)Se2 systems at 570 K were investigated by the X-ray powder diffraction method. The existence of the compound Tl2CdSnSe4 was confirmed. For the first time, a successful synthesis of a Tl2CdSnSe4 single crystal was carried out. For the first time, the formation of new quaternary compounds Tl2CdGe3Se8 and three isostructural chalcogenides Tl2CdGeSe4, Tl2CdSiTe4, Tl2HgSiTe4 was established. The composition of Tl2CdGe3Se8 was confirmed by SEM and EDS. The crystal structure of compounds of the type Tl2VIIDIVX4 was determined. A comprehensive experimental and theoretical study of electronic properties and optical constants was performed. The obtained experimental XPS measurements of the crystal surface of Tl2CdSnSe4, Tl2HgSnS4 irradiated with Ar+ ions of medium energy, and the data of theoretical DFT calculations show that, despite the rather dangerous component chemical elements, thallium and cadmium, the crystal surface is quite stable and in combination with the corresponding width of the band gap zones makes the studied quaternary selenide a very promising semiconductor for use in thin-film solar cells and optoelectronics, as well as in highly efficient photocatalytic devices. A number of quasi-ternary systems of the Tl2Se–Ga(In)2Se3–SnSe2 type were studied using the methods of physical and chemical analysis, and their isothermal sections at 520 K in the full concentration interval were constructed. The existence of 2 new compounds Tl2Ga2SnSe6 and Tl5,6InSn6,7S17,6 was established. It was established that the investigated crystals are photosensitive materials, which allows the use of these crystals for the development of photoresistors,

photodiodes and other optoelectronic devices. Two new selenides Tl2Ga2SnSe6 and Tl2Ga2GeSe6 were synthesized. Studies of NLO properties of the third order have shown that the generation of the third harmonic is sensitive to external photoinducing irradiation. Thus, there is a rare

**Індекс УДК:** 538.945, УДК 538.945:546.22/.24(043.5)

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.29

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Кітик Іван Васильович

**Науковий ступінь:** д. ф.-м. н.

**Вчене звання:** професор

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Синтез, структура та властивості нових тетрарних халькогенідів для термо- та оптоелектроніки

**Назва НТП англійською:** Synthesis, structure and properties of new tetra-chalcogenides for thermo- and optoelectronics

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Методи, теорії, Методичні документи

**Галузь застосування:** Освіта, наука, професійні об'єднання

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Вперше проведено успішний синтез монокристала Tl2CdSnSe4. Вперше встановлено утворення нових почетверенних сполук Tl2CdGe3Se8 і трьох ізоструктурних халькогенідів Tl2CdGeSe4, Tl2CdSiTe4, Tl2HgSiTe4. Встановлено існування 2 нових сполук Tl2Ga2SnSe6 і Tl5,6InSn6,7S17,6. Встановлено, що досліджувані кристали є фоточутливими матеріалами, що дозволяє використовувати дані кристали для розробки фоторезисторів, фотодіодів та інших приладів оптоелектроніки. Дослідження нелінійно-оптичних властивостей третього порядку нових селенідів Tl2Ga2SnSe6 й Tl2Ga2GeSe6 показали, що генерація третьої гармоніки чутлива для зовнішнього фотоіндукуючого опромінення. Таким чином, спостерігається рідкісна можливість модулювати інтенсивність сигналу ГТГ, що дозволяє розглядати ці сполуки як новий тип нелінійно-оптичних лазерних модуляторів.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Забезпечення промисловості чи населення новим видом інформаційно-комунікаційних послуг

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 01.2019

**Закінчення етапу:** 12.2021

**Споживачі продукції:** Аспіранти, студенти, викладачі ВНУ імені Лесі Українки

**Перспективні ринки:** Ринки науково-технічної продукції

**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

1. Selezen A.O., Piskach L.V., Parasyuk O.V., Olekseyuk I.D. The Tl2SnSe3-CdSe System and the Crystal Structure of the Tl2CdSnSe4 Compound / Journal of Phase Equilibria and Diffusion 2019, Vol. 40, Issue 6, pp 797–801

2. Vaidotas Kažukauskas, Galyna L. Myronchuk, Oleh V. Parasyuk, Edvinas Gvozdiovas, Oleksiy V. Novosad, Justas Kvedaravičius, Sergiy P. Danylchuk, Lyudmyla V. Piskach Photoconductivity Of Tl1-XIn1-XSnXSe2 single crystals at low temperatures / Proceedings Of The Romanian Academy, Series A Vol. 20, Number 3, 2019, p. 243–249

3. A.O. Selezen, I.D. Olekseyuk, G.L. Myronchuk, O.V. Smitiukh, L.V. Piskach Synthesis and structure of the new semiconductor compounds Tl2BIIDIVX4 (BII–Cd, Hg; DIV–Si, Ge; X–Se, Te) and isothermal sections of the Tl2Se–CdSe-Ge(Sn)Se2 systems at 570 K // Journal of Solid State Chemistry, 2020, V. 289, P. 121422.

4. Tsisar O.V., Piskach L.V., Marushko L.P., Kadykalo E.M., Myronchuk G.L., A.Makhnovetz A., Denysyuk M., Reshak A.H., El-Naggar A.M., Albassam, A.A., Kityk, I.V. Optical features of novel semiconducting crystals Tl1–xGa1–xSnxSe2 (x=0.05; 0.1) Optik 2020, V. 206, 163572. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163572.

5. Volodymyr Babizhetskyy, Volodymyr Levytskyy, Volodymyr Smetana, Magdalena Wilk-Kozubek, Oksana Tsisar, Lyudmyla Piskach, Oleg Parasyuk and Anja-Verena Mudring, New cation-disordered quaternary selenides Tl2Ga2TtSe6 (Tt = Ge, Sn) // Z. Naturforsch. 2020; 75(1–2)b: 135–142 https://doi.org/10.1515/znb-2019-0169.

6. Mykhailo Ya. Valakh, Volodymyr M. Dzhagan, Volodymyr M. Dzhagan, Nazar V. Mazur, Yevhenii O. Havryliuk, Volodymyr O. Yukhymchuk, Lyudmyla V. Piskach, Yurii M. Kogut, Dietrich R. T. Zahn, Alexander P. Litvinchuk, Raman and Infrared Phonon Spectra of Novel Nonlinear Optical Materials PbGa2GeS6 and PbGa2GeSe6: Experiment and Theory // Physica Status Solidi (B) 2020, V. 257, № 5, P. 1900700. https://doi.org/10.1002/pssb.201900700.

7. Vu T.V., Lavrentyev A.A., Gabrelian B.V., Selezen A.O., Piskach L.V., Olekseyuk Ivan D., Myronchuk G.L., Denysyuk M., Tkach V.A., Hieu Nguyen N., Pham Khang D., Khyzhun O.Y. Quaternary Tl2CdGeSe4 selenide: Electronic structure and optical properties of a novel semiconductor for potential application in optoelectronics // Journal of Solid State Chemistry 302, 122453 (13 p.). DOI: 10.1016/j.jssc.2021.122453

8. Tuan V.Vu, A.A.Lavrentyev, B.V.Gabrelian, A.O.Selezen, L.V.Piskach, G.L.Myronchuk, M.Denysyuk, V.A.Tkach, Khang D.Pham, O.Y.Khyzhun. Crystal growth, electronic and optical properties of Tl2CdSnSe4, a recently discovered prospective semiconductor for application in thin film solar cells and optoelectronics. Optical Materials, Vol. 111. 2021. 110656 https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.110656.

9. DanylchukS., ZamuruevaO., SakhnyukV., & FedosovS. (2021). Photonic properties of devices based on multicomponent crystalline compounds with content (Si, Ge, Sn). Physics and Chemistry of Solid State, 22(3), 470-476. https://doi.org/10.15330/pcss.22.3.470-476

10. A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, T.V. Vu, L.N. Ananchenko, G.L. Myronchuk, O. V. Parasyuk, V.A. Tkach, K.I. Kopylova, O.Y. Khyzhun, Electronic and optical properties of quaternary sulfide Tl2HgSnS4, a promising optoelectronic semiconductor: a combined experimental and theoretical study, Opt. Mater. 92 (2019) 294–302.

11. Tuan V.Vu, I.V.Luzhnyi, G.L.Myronchuk, V.L.Bekenev, M.S.Bohdanyuk, A.A.Lavrentyev, B.V.Gabrelian, O.V.Parasyuk, O.Y.Khyzhun. DFT calculations and experimental studies of the electronic structure and optical properties of Tl4PbI6. Optical Materials. Vol. 114. 2021. 110982. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.110982

12. Quaternary Chalcogenide Semiconductors Tl2MIIMIV3Se8 and Tl2MIIMIVX4, Andrii O Selezen, Yuri M Kogut, Lyudmyla V Piskach, Lubomir D Gulay // The 2nd International Online Conference on Crystals Crystals-2020, November 10–20, 2020. doi: 10.3390/IOCC_2020-07314

13. Цісар О.В., Л.В. Піскач, Г.Л. Мирончук, І.В. Кітик Нелінійно-оптичні властивості сполук TlCIIIDIV2X6 / «Перспективні технології та прилади» В.14., 2019, с.146-149

14. Новосад О.В., Мирончук Г.Л., О.В., С.П. Данильчук, О.В. Замруєва, Л.В. Піскач, І.В. Кітик, М.В. Пясецький, О.В. Цісар Особливості фотопровідності монокристалів Tl1-xIn1-xSnxSe2 при низьких температурах // Фізика і хімія твердого тіла. 2019, 20, 1, 50-55.

15. Volodymyr Babizhetskyy, Volodymyr Levytskyy, Volodymyr Smetana, Magdalena Wilk-Kozubek, Oksana Tsisar, Lyudmyla Piskach, Oleg Parasyuk, Anja-Verena Mudring New cation-disordered quaternary selenides Tl2Ga2TtSe6 (Tt=Ge, Sn) / Zeitschrift für Naturforschung B, 20190169, ISSN (Online) 1865-7117, ISSN (Print) 0932-0776, DOI: https://doi.org/10.1515/znb-2019-0169

16. Oksana Zamurueva, Oksana Tsisar, Lyudmula Piskach, Oleg Parasyuk, Galyna Myronchuk, Michal Piasecki Tl2S–In2S3–GeS2 glass system as novel promising materials for photonics / Фізика і хімія твердого тіла, т.4, 2019, .416-422

17. Олексеюк, І., Когут, Ю., Піскач, Л. Фазові рівноваги на ізотермічних перерізах квазіпотрійних систем Ag(Cu)2X–PbX–SnX2 (X=S, Se) при 300 К. // Проблеми хімії та сталого розвитку, (2021), 1, 26–30. doi: https://doi.org/10.32782/pcsd-2021-1-4

18. Олексеюк, І., Когут, Ю., Піскач, Л. Області склоутворення та термічні параметри стекол у системах Ag2Se–Zn(Cd,Hg)Se–GeSe2 // Проблеми хімії та сталого розвитку, (2021), 2, 19–25. doi: https://doi.org/10.32782/pcsd-2021-2-4

19. Олексеюк, І., Селезень, А., Смітюх, О., Гулай, Л., Піскач, Л. Тетрарні халькогеніди систем Tl2X–BIIX–DIVX2 (BII – Cd, Hg, DIV – Si, Ge; X – Se, Te // Проблеми хімії та сталого розвитку, (2021), 2, 26–37, doi: https://doi.org/10.32782/pcsd-2021-2-5

20. Цісар, О., Олексеюк, І., Марушко, Л., Кадикало, Е., Піскач, Л. Взаємодія у системах Tl2Se–Ga(In)2Se3–SnSe2 // Проблеми хімії та сталого розвитку, (2021). 2, 48–56, doi: https://doi.org/10.32782/pcsd-2021-2-8

21. Замруєва, О., Данильчук, С. (2021) Встановлення впливу катіонного заміщення на фізичні властивості кристалів твердих розчинів групи AIIIBIIIC2VI. Фізика та освітні технології, 2, 23–30, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2021-2-4

22. Юрченко О.М., Піскач Л.В., Панкевич В.З., Цісар О.В. Спосіб отримання монокристалів Tl1-xIn1-xSnXSe2 (x=0,0.1, 0.2, 0.25) : пат. 145756 Україна : C30B 11/00. № u201910933; заявл. 6.11.2019; опубл. 6.01.2021; Бюл. №1/2021. https://base.uipv.org/searchINV/search.php?action=viewdetails&IdClaim=273473

23. Юрченко О. М., Піскач Л. В., Цісар О. В.. Кормош Ж. О., Мацьків О. О., Решетняк С. О., Головацький В. А. Спосіб отримання монокристалів TlInSnS4. Пат. 147877, C30B 11/00. - № u202100706; Заявл. 17.02.2021; Опубл. 16.06.2021, Бюл. № 24, 2021 р. https://base.uipv.org/searchINV/search.php?action=viewdetails&IdClaim=276616

24. Юрченко О. М., Піскач Л. В., Цісар О. В.. Кормош Ж. О., Мацьків О. О., Решетняк С. О., Головацький В. А. Спосіб отримання монокристалів TlInGe2Se6 Пат. 147879, C30B 11/00. - № u202100731; Заявл. 18.02.2021; Опубл. 16.06.2021, Бюл. № 24, 2021 р. https://base.uipv.org/searchINV/search.php?action=viewdetails&IdClaim=276618

25. Юрченко О.М., Лавринюк З.В., Панкевич В.З., Піскач Л.В., Кормош Ж.О., Мацьків О.О. Спосіб отримання монокристалів AgGaGe3-xSnxSe8 (x=0,1, 0,15, 0,2, 0,3): пат. 147882 Україна, C30B 11/00. № u 2021 00745; заявл. 19.02.2021; опубл. 16.06.2021, Бюл. № 24/2021.

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Цьось Анатолій Васильович

**Перелік осіб-виконавців**

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

Кітик Іван Васильович
(д. ф.-м. н.)

Мирончук Галина Леонідівна
(д. ф.-м. н., 01.04.10)

Пясецький Міхал Войцех
(д. ф.-м. н.)

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

Хижун Олег Юліанович
(д.ф.-м.н., 01.04.07)

**Відповідальний за підготовку облікових документів** Ліповська Наталія Іванівна

**Телефон** +38 (050) 675-66-00

**Реєстратор**

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