

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U004990

Державний реєстраційний номер: 0121U109484

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Нові суперіонні провідники на основі аргіродитів для високоефективних твердоелектролітичних джерел енергії

Початок етапу: 03.2021

Закінчення етапу: 12.2023

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, буд. 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: 380312613396, 380312613321

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 Берестейський, 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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 498.840
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові суперіонні провідники на основі аргіродитів для високоефективних твердоелектролітичних джерел енергії

Назва роботи англійською:

New superionic argyrodite based conductors for highly effective solid-state energy sources

Реферат українською:

На основі даних диференційного-термічного (ДТА) та рентгенофазового (РФА) аналізів розроблено близькі до оптимальних технологічні режими синтезу та вирощування монокристалів твердих розчинів складу $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ (де $x=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$). Удосконалено методологію виготовлення суперіонних керамік на основі мікро- та нанокристалічних порошків твердих розчинів $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$. Одержані монокристалічні та керамічні (отримані з мікро- та нанокристалічних порошків) зразки досліджено з використанням рентгеноструктурного, рентгенофазового та мікроструктурного (скануюча електронна мікроскопія та енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія) аналізів, оптичних методів (дифузного відбивання, оптичного пропускання, спектральної еліпсометрії), вимірювання електропровідності (метод імпедансної спектроскопії) та мікротвердості. Вперше встановлено механізм утворення твердих розчинів $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$. За допомогою теорії функціоналу густини встановлено, що катіонне заміщення $\text{Si}^{4+}\text{Ge}^{4+}$ призводить до збільшення стабільності кристалічної ґратки. Дослідження зміни мікротвердості в рамках градієнтної теорії пластичності свідчать про пластичну деформацію монокристалічних та керамічних зразків твердих розчинів $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$. За результатами вимірювань електропровідності методом імпедансної спектроскопії монокристалічні та керамічні зразки твердих розчинів $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ характеризуються достатньо низьким значенням електронної (σ_{e}) та високими значеннями іонної складових провідності. Показано, що зменшення розміру кристалітів (використання керамічних матеріалів) призводить до збільшення іонної складової провідності, що дозволяє підвищити загальну технологічність матеріалів для практичного застосування. За допомогою оптичних методів дослідження встановлено наявність композиційного розупорядкування кристалічної структури при катіонному $\text{Si}^{4+}\text{Ge}^{4+}$ заміщенні. Електричні, структурні та оптичні дослідження показали, що параметри, якими характеризуються монокристалічні т

Реферат англійською:

Based on the data of differential thermal analysis (DTA) and X-ray diffraction analysis (XRD), close to optimal technological regimes for the synthesis and growth of single crystals of solid solutions of $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ composition (where $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$) were developed. The methodology for the preparation of superionic ceramics based on micro- and nanocrystalline powders of $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions has been improved. The obtained single crystalline and ceramic (obtained from micro- and nanocrystalline powders) materials were studied using X-ray diffraction and microstructural (scanning electron microscopy and energy dispersive X-ray spectroscopy) analyses, optical methods (diffuse reflection, optical transmission, spectral ellipsometry), electrical conductivity (impedance spectroscopy) and microhardness measurements. The mechanism of the $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions formation has been established for the first time. Using the density functional theory, it was found that the cationic substitution $\text{Si}^{4+}\text{Ge}^{4+}$ leads to an increase in the stability of the crystal lattice. Studies of microhardness changes within the framework of the gradient theory of plasticity indicate plastic deformation of single crystals and ceramic samples of $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions. According to the results of electrical conductivity measurements by impedance spectroscopy, single-crystal and ceramic samples of $\text{Ag}_7(\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions are characterized by a rather low value of the electronic and high values of the ionic components (σ_{ion}) of conductivity. It has been shown that reducing the size of crystallites (applicable to ceramic materials) leads to an increase in the ionic component of conductivity, which makes it

possible to increase the overall manufacturability of materials for practical applications. Using optical methods, the presence of a compositional disorder of the crystal structure at cationic $\text{Si}^{+4} \leftrightarrow \text{Ge}^{+4}$ substitution was established.

Індекс УДК: 537-311.322 , 546; 54-386 , 546.571 + 546.05 + 548.55 + 548.313 + 537.311.6

Коди тематичних рубрик: 29.19.31, 31.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кохан Олександр Павлович

Науковий ступінь: к.х.н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Перспективні Ag⁺ провідні матеріали на основі твердих розчинів Ag₇(Ge_{1-x}Si_x)S₅I зі структурою аргіродиту одержані у монокристалічному, полікристалічному та нанокристалічному вигляді.

Назва НТП англійською: Perspective Ag⁺ conductive materials based on Ag₇(Ge_{1-x}Si_x)S₅I solid solutions with an argyrodite structure in single crystal, polycrystalline, and nanocrystalline form

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Енергоощадні технології

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Одержані в результаті виконання НДР функціональні матеріали є основою створення твердотільних джерел енергії на основі Ag⁺ іонних провідників, за рахунок високої іонної провідності (10⁻³ до 10⁻² См/см), а отже і високих значень ємності. Дані параметри покращені в 1.2 до 2.8 рази при використанні в якості електроактивного матеріалу мікро- та нанокристалічних зразків за рахунок збільшення ефективної робочої площі, а також відзначатися простотою у виробництві, відсутністю деградації на повітрі, а також надійністю та безпечністю під час використання.

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Pogodin A.I., Studenyak I.P., Shender I.A., Pop M.M., Filep M.J., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Kopčanský P., Babuka T.Y. Crystal structure, ion transport and optical properties of new high-conductivity $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions. Journal of Materials Science. 2022. Vol. 57. P. 6706–6722. <https://doi.org/10.1007/s10853-022-07059-1> Q1

Pogodin A., Malakhovska T., Filep M., Kokhan O., Shender I., Studenyak Y., Zhukova Y. Optical pseudogap of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{S}_5\text{I}$ solid solutions. Ukrainian Journal of Physical Optics. – 2022. Vol. 23 (2). P. 77–85. <https://doi.org/10.3116/16091833/23/2/77/2022> Q4

Скубеніч К., Біланич В., Погодін А., Філеп М. Електричні, структурні та механічні властивості суперіонних провідників: монографія. Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2023. 334 с. ISBN 978-617-8321-01-7 (Формат 60×84/16), к-ть друк. арк. 19.53

. Bletska D., Vakulchak V., Studenyak V., Pogodin A., Studenyak I. DFT+ U Calculations of Electronic Structure and Optical Properties of $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ Compound // 2021 IEEE 12th International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT) – 2021. – pp. 270–274, <https://doi.org/10.1109/ELIT53502.2021.9501134>

Патент України на корисну модель № 152229 «Застосування суперіонної кераміки на основі мікрокристалічного йодид-пентатіогерманату срібла $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ як матеріалу для твердоелектролітичного джерела енергії» МПК H01M 6/18. № u202105291; заявл. 20.09.2021.; опубл. 11.01.2023., Бюл. №2. Студеняк І.П., Погодін А.І., Студеняк В.І., Шендер І.О., Ямковий О.О., Кохан О.П.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Миронюк Іван Святославович
д.мед.н.

Перелік осіб-виконавців

Біланич Віталій Степанович
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Малаховська Тетяна Олександрівна
(к. х. н.)

Погодін Артем Ігорович
(к. х. н.)

Поп Михайло Михайлович
(к. ф.-м. н.)

Шендер Ірина Олександрівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Фречка Наталія Іванівна

Телефон

+38 (050) 148-61-31

Реєстратор

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

