Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U006888

Державний реєстраційний номер: 0116U008069

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-10-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Наноструктуровані та полікристалічні РЗМ-вмісні матеріали для сцинтиляторів, сенсорів та енергоощадних технологій

Початок етапу: 08.2016

Закінчення етапу: 07.2018

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (032) 255 41 00

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1006.6

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Наноструктуровані та полікристалічні РЗМ-вмісні матеріали для сцинтиляторів, сенсорів та енергоощадних технологій

Назва роботи англійською:

Nanostructurized and polycrystalline RE-contained materials for scintillators, sensors and energy saving technologies

Реферат українською:

Метою роботи є цілеспрямована зміна характеристик та властивостей сенсорних матеріалів і пристроїв на їх основі, яка включає в себе: встановлення взаємозв'язків між умовами отримання, дефектною структурою і особливостями спектрально-люмінесцентних характеристик у нанооб'єктах на основі оксидів галатів та вольфраматів; отримання високоефективних фотонних середовищ на основі халькогенідів; РЗМ-вмісних купратів та манганатів, а також модифікація їхніх кристалічних структур шляхом часткових заміщень атомів; матеріалів анодів літієвих і металогідридних акумуляторів для досягнення вищих питомих характеристик, нижчої вартості і вищої цикльованості порівняно з застосованими в промисловості. Методи дослідження - синтез експериментальних зразків, рентгенофазовий, рентгеноструктурний, мікроструктурний, локальний рентгеноспектральний, спектрально-люмінесцентний аналіз, електрохімічне гідрування, диференціальна скануюча калориметрія, спектроскопія глибоких рівнів. Підібрано та оптимізовано умови синтезу складних купратів та манганатів методом твердофазної реакції з метою отримання якісних полікристалічних зразків. Синтезовано та підтверджено кристалічну структуру, встановлено фазовий склад серій зразків MgGa2O4, MgGa2O4:Mn, MgGa2O4:Mn, Eu, ZnGa2O4:Mn, ZnGa2O4:Mn, Eu, Mg1-xZnxGa2O4:Mn та Mg1 xZnxGa2O4:Mn, Eu. РЕМ та ТЕМ зображення засвідчили гомогенність отриманих зразків та рівномірний розподіл домішок РЗМ у об'ємі кераміки. Показано, що в стеклах системи Gax(As0.40Se0.60)100-x при збільшенні вмісту Ga відбувається збільшення твердості та модулю Юнга. Показано, що в стеклах з вмістом Ga менше 3 ат. %, домінує позитронне захоплення на внутрішніх порожнинах між пірамідальними комплексами AsSe3/2. Спостерігається збільшення часу життя, пов'язаного з дефектами, від 0,360 до 0,382 нс. Вивчено взаємодію компонентів у системах SrO-R2O3-MnO, Ba-Mn-O, R-Mn-O, BaO-Tb2O3-CuO, Ce-Zr-Sb, Gd-Zr-Sb. Синтезовано нові сполуки (Sr,R)FeO3 (R = Tb, Ho, Er) зі структурою перовскіту. Синтезовано і досліджено інтерметалічні фази, які можуть бути використані у літієвих і металогідридних акумуляторах. Досліджено їхню електрохімічну поведінку у ролі анодних матеріалів. Виявлений значний позитивний вплив легування Sn на заряд-розрядні характеристики.

Реферат англійською:

The aim of the work is the purposeful modification of characteristics and properties of sensor materials and devices on their base, which includes: determination of interconnections between conditions of synthesis, defect structure and features of the optical-luminescent characteristics in nano-objects of gallate and tungstate oxides; obtaining of high-efficient environments of chalcogenide glasses; cuprates and manganetes with RE metals and modification of their crystalline structure by partial substitution of atoms; anode materials of lithium and metal-hydride rechargeable batteries for achievement of higher specific characteristics, lower price and better cycle lifetime with respect to conventional industrial samples. Investigation methods – synthesis of experimental samples, X-ray diffraction analysis of phase and structure, microstructural, local X-ray and luminescent spectral analyses, electrochemical hydration, differential scanning calorimetry, spectroscopy of the deep levels. The conditions for the synthesis of complex cuprates and manganates by the solid-phase reaction method have been selected and optimized in order to obtain qualitative polycrystalline specimens. The structure of successfully synthesized MgGa2O4, MgGa2O4: Mn, MgGa2O4: Mn, Eu, Zn Ga2O4: Mn, Zu Ga2O4: Mn, Eu, Mg1-xZnx Ga2O4: Mn

and Mg1-xZnxGa2O4: Mn, Eu samples was established and confirmed. The REM and TEM images showed the homogeneity of the samples obtained and the uniform distribution of RE impurities in the volume of ceramics. Increasing of the hardness and Young's module was found in the glass systems of Gax(As0.40Se0.60)100-xwith increasing of Ga concentration. The positron trapping dominates in the inner cavities between the pyramidal complexes AsSe3/2 in glasses that contains the Ga less than 3 atm. %. An increase in lifetime from 0.360 to 0.382 ns associates with defects was observed. The interaction of components in SrO-R2O3-MnO, Ba-Mn-O, R-Mn-O, BaO-Tb2O3-CuO, Ce-Zr-Sb, Gd-Zr-Sb systems was studied. (Sr, R) FeO3 (R = Tb, Ho, Er) are new compounds with the structure of perovskite were synthesized. Intermetallic phases have been synthesized and investigated, which can be used in lithium and metal hydride accumulators. Their electrochemical behavior in the role of anodic materials is studied. Significant positive influence of doping with Sn on charge-discharge characteristics has been revealed.

Індекс УДК: 531.787, 535.372, 535-15

Коди тематичних рубрик: 59.37.31

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Шпотюк Ярослав Олегович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Матеріали складних оксидів та халькогенідні стекла із домішками РЗМ для біосенсорики, техноголігя модифікації властивостей цих матеріалів для модифікації їх властивостей; куприти та манганати із РЗМ придатні для використання літієвих та металогідридних акумуляторів

Назва НТП англійською: Materials of complex oxides and chalcogenides with rare-earth ions for biosensors, the technology of modification of their properties; cuprates and manganetes with rare-earth ions for lithium and metalhydride accumulators

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.0 Дослідження і розробка в галузі природничих та технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В даній НДР отримано нові системи халькогенідних стекол легованих іонами рідкісноземельних металів; галійвмісні оксиди та вольфрамати з домішками РЗМ; куприти серії (M, R)2Cu2O3-CuO2 та манганати систем M-R-Mn-O; РЗМ-вмісні змішані оксиди з елементами IV-ої групи; РЗМ- і літійвмісні інтерметаліди перехідних металів а також проведено вхідну характеризацію даних обєктів. Запропоновано хімічні склади з оптимальними фізико-хімічними властивостями для подальших досліджень.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2018 рік

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні та виробничі підприємства високотехнологічної продукції

Перспективні ринки: України та закордонні

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 3500

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 2000

Очікуваний термін окупності (років): 5

Додаткова інформація: згідно договору

IX. Бібліографічний опис

ShpotyukYa. Nanoscale mechanism of rare-earth doping in Ga-codoped glassy As-Sb selenides / Ya. Shpotyuk // J. Am. Ceram.Soc. Vol. 100.- 2017. -P. 3865-3874. Pavlyuk V. Li9Al4Sn5 as a new ordered superstructure of the Li13Sn5 type / V. Pavlyuk, G. Dmytriv, I. Tarasiuk, H. Ehrenberg // Acta Crystal. C: Struct. Chem. - 2017. - V. 73. - P. 337-342. Shpotyuk O. Solid-state amorphization of As45S55 alloy induced by high-energy mechanical milling / O. Shpotyuk, A. Kozdras, P. Demchenko, Ya. Shpotyuk, Z. Buj??kov?, P. Bal?? // Thermochimica Acta - 2016. - V.642. - P. 59-66. ShpotyukYa. Effect of rare-earth doping on free-volume nanostructure of Ga-codoped glassy (As/Sb)2Se3 / Ya. Shpotyuk // Nanoscale Research Letters - 2017. - V.12. - P. 191-1-7. Luk'yanov M. Synthesis and structure of [Cu(Hapn)]NO3]NO3, [Cu(Hapn)(H2O)2]SiF6, [Cu(Hapn)(H2O)BF4]BF4·H2O and [Cu(Hapn)(NH2SO3)] ?-complexes (apn = 3-(prop-2-en-1-ylamino)propanenitrile) / M. Luk'yanov, E. Goreshnik, V. Kinzhybalo, M. Mys'kiv // Acta. Chim. Slov. - 2017. - Vol. 64, No.1. - P. 208-214. ShpotyukYa. Nanoscale inhomogeneities mapping in Ga-modified arsenic selenide glasses / Ya. Shpotyuk, S. Adamiak, A. Dziedzic, J. Szlezak, W. Bochnowski, J. Cebulski // Nanoscale Research Letters - 2017. - V.12. P. 88-1-5. Bal?? M. Plant-mediated synthesis of silver nanoparticles and their stabilization by wet stirred media milling / M. Bal??, ?. Bal??ov?, N. Daneu, E. Dutkov?, M. Bal??ov?, Z. Buj??kov?, Ya. Shpotyuk // Nanoscale Res. Lett.-2017.-V.12.- P. 83. Ardan B. Ligand forced dimerization of copper(I)-olefin complexes bearing 1,3,4-thiadiazole core / B. Ardan, V. Kinzhybalo, Yu. Slyvka, O. Shyyka, M. Luk'yanov, T. Lis, M. Mys'kiv // Acta Crystallogr., Sect. C. - 2017. - Vol. 73. - P. 36-46. ShpotyukYa. The influence of Sb on glass forming ability of Ga-containing As2Se3 glasses / Ya. Shpotyuk, C. Boussard, V. Nazabal, B. Bureau // J. Am. Ceram.Soc. - 2017. - V.100. - P. 1388-1394. Shpotyuk O. Nanostructurization effects in PVP-stabilized tetra-arsenic tetra-sulfide As4S4 nanocomposites / O. Shpotyuk, Z. Buj??kov?, P. Bal??, A. Ingram, P. Demchenko, A. Kovalskiy, M. Vlcek, Ya. Shpotyuk, J. Cebulski, A. Dziedzic // Materials Chemistry and Physics - 2017. - V.186. - P. 251-260. Slyvka Yu. The first copper(I)-olefin complexes bearing a 1,3,4-oxadiazole core: alternating-current electrochemical crystallization, X-ray experiment and DFT study / Yu. Slyvka, E. Goreshnik, G. Veryasov, D. Morozov, M. Luk'yanov, M. Mys'kiv // Polyhedron. - 2017. - Vol. 133. - P. 319-326. Bal?? P. Properties of arsenic sulphide (?-As4S4) modified by mechanical activation / P. Bal??, M. Bal??, O. Shpotyuk, P. Demchenko, J. Brian?in, Z. Buj??kov?, Ya. Shpotyuk, et al // Journal of Materials Science - 2017. - V.52. P. 1747-1758. Pavlyk B.V. Origin of dislocation luminescence centers and their reorganization in p-type silicon crystal subjected to plastic deformation and high temperature annealing / B.V. Pavlyk, M.O. Kushlyk, D.P. Slobodzyan // Nanoscale Research Letters. - 2017. - 12, 358. - P. 1-8. Luchechko A. Novel visible phosphors based on MgGa2O4-ZnGa2O4 solid solutions with spinel structure co-doped with Mn2+ and Eu3+ ions / A. Luchecko, O. Kravets // J. Lumin. Vol. - 192. - 2017. - P. 11-16. Luchechko A. Synthesis and luminescent properties of magnesium gallate spinel doped with Mn2+ and Eu3+ ions / A. Luchechko, O. Kravets // Phys. Status Solidi C. - Vol. 14 (1-2). - 2017. - P. 1600146. Ya. Shpotyuk. Mathematical modeling of elementary trapping-reduction processes in positron annihilation lifetime spectroscopy: methodology of Ps-to-positron trapping conversion / Shpotyuk Ya., Cebulski J., Ingram A., Shpotyuk O. // J. Phys.: Conf. Ser.. - V. 936.-2017. - P. 012049-1-4. Oshchapovsky I. Investigation of the compound La5Zn2?xPb1+x (x=0.20-0.32) / I. Oshchapovsky, V. Pavlyuk, G. Dmytriv // Z. Kristallogr. NCS. ? 2018. ? Vol. 233. ? P. 83-84. Slyvka Yu. Synthesis, structural and NLO properties of the novel copper (I) p-toluenesulfonate ?-complex with 1-allyloxybenzotriazole / Yu. Slyvka, A.A. Fedorchuk, E. Goreshnik, G. Lakshminarayana, I.V. Kityk, P. Czaja, M. Mys'kiv // Chem. Phys. Lett. - 2018. - Vol. 694. - P. 112 119. Slyvka Yu.I. A novel copper(I) sulfamate ?-complex based on 5-(allylthio)-1-(3,5-dimethylphenyl)-1H-tetrazole ligand: alternating-current electrochemical crystallization, DFT calculations, structural and NLO properties studies / Yu.I. Slyvka, A.A. Fedorchuk, N.T. Pokhodylo, T. Lis, I.V. Kityk, M.G. Mys'kiv // Polyhedron. - 2018. - Vol. 147. - P. 86 93. Golovchak R. Giant visible and infrared light attenuation effect in nanostructured narrow-bandgap glasses / R. Golovchak, Ya. Shpotyuk, J. Szl?zak, A. Dziedzic, A. Ingram, J. Cebulski. // Optics Lett. - 2018. - Vol. 43. - P. 387-390. Shpotyuk O. Free-volume characterization of nanostructurized substances by positron annihilation lifetime spectroscopy / O. Shpotyuk, A. Ingram, Ya. Shpotyuk // Nuc. Inst. Method. Phys. Res. B. - 2018. - Vol. 416. - P. 102-109.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович

Перелік осіб-виконавців

Заремба Оксана Іванівна

Кравець Олег Петрович

Кушлик Маркіян Олегович

Лис Роман Мирославович

Лук'янов Михайло Юрійович

Ощаповський Ігор Валентинович

Сенчук Олександр Юрійович

Сливка Юрій Іванович

Слободзян Дмитро Петрович

Тарасюк Іван Іванович

Шпотюк Ярослав Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

