Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106030

Державний реєстраційний номер: 0120U104913

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-09-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження абсорбційних спектрів, люмінесцентних та сцинтиляційних параметрів перовскітів, фероїків і споріднених матеріалів. Аналіз хімічного зв'язку та розрахунок спектрів оптичних функцій на основі результатів моделювання електронного спектра. Характеризація отриманих фероїків, перовскітів і споріднених матеріалів. Оптимізація структурних моделей для опису властивостей перовскітів і споріднених матеріалів.

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 08.2021

Вид звітного документа: Проміжний 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: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1289.751

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Багатофункціональні органічно-неорганічні магнітоелектричні, фотовольтаїчні і сцинтиляційні матеріали

Назва роботи англійською:

Multifunctional organic-inorganic magnetoelectric, photovoltaic and scintillation materials

Реферат українською:

Експериментально вивчено динаміку енергетичних рівнів та відповідність ширини забороненої зони у перовскітах і фероїках задачам проекту, а також спектри рентгенолюмінесценції і сцинтиляційні параметри перовскітів і споріднених матеріалів. Показано, що при низьких температурах (7 K) кристал CsPbBr3 є яскравим сцинтилятором, який демонструє дуже коротку сталу часу загасання – 1 нс. Досліджено кристалічну структуру, послідовності фаз і базові властивості низки фероїків. Продемонстровано, що кристал (NH4)2CuCl4×2H2O є магнітним мультифероїком, оскільки володіє феромагнітною фазою при T<0,7 K і сегнетоеластоелектричною фазою при T<200,5 K. Проведено першопринципні дослідження структурних, пружних, вібраційних, електронних та оптичних властивостей кристалів CsPbBr3 та CH3NH3PbBr3 з використанням різних наближень для обмінно-кореляційного потенціалу і встановлено рівноважні структурні моделі. Найкраще узгодження між теоретичними та експериментальними результатами отримано при використанні наближень GGA (PBEsol) і GGA (PBEsol)+U.

Реферат англійською:

The dynamics of the energy levels and matching of the bandgaps in the perovskites and ferroics to the project goals as well as the spectra of luminescence and scintillation parameters of the perovskites and related materials were experimentally investigated. It was shown that at low temperatures (7 K) CsPbBr3 crystal is a bright scintillator demonstrating very short decay time – 1 ns. The crystal structure, phase sequences and basic properties of the row of ferroics was investigated. (NH4)2CuCl4×2H2O crystal was found to be magnetic multiferroic, since it possesses the ferromagnetic phase at T<0,7 K and ferroelastoelectric phase at T<200,5 K. The first principle investigations of the structural, elastic, vibrational, electronic and optical properties of CsPbBr3 and CH3NH3PbBr3 crystals using different approximations for the exchange-correlation potential were performed and the equilibrium structural models were determined. The best coincidence between the theoretical and experimental results was found to be for the GGA (PBEsol) and GGA (PBEsol)+U approximations.

Індекс УДК: 621.311.243, 621.315.592, 621.315.61, 666.655; 621.315.612, 621.318.1, 666.265; 621.387.464

Коди тематичних рубрик: 44.37.31, 47.09.29, 47.09.31, 47.09.33, 47.09.35, 47.09.43

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Капустяник Володимир Богданович

Науковий ступінь: д.ф.-м.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Спосіб отримання композитного матеріалу з покращеними термохромними властивостями

Назва НТП англійською: The method of obtaining of a composite material with improved thermochromic properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології

Галузь застосування: сенсорна техніка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Використовується як спосіб отримання термохромного матеріалу для індикаторів температури, термографії та пристроїв оптичного запису інформації. Спосіб отримання композитного матеріалу з покращеними термохромними властивостями полягає у впровадженні в матрицю з полістиролу механічно подрібнених мікрокристалів диетиламінтетрахлоркупрату (NH2(C2H5)2)2CuCl4 (DEACC) розміром порядку 200 мкм. Такий спосіб дає змогу отримати композити з термохромним переходом першого роду, що є необхідною умовою для створення на їхній основі індикаторів температури і чутливих елементів для термографії.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Rudko M. Luminescent and scintillation properties of perovskites CsPbBr3 crystal at cryogenic temperatures / M. Rudko, V. Kolomiets, V. Kapustianyk, R. Gamernyk, V. Mykhaylyk // J. Phys. Stud. – 2021. – V. 25, No 1. – P. 1201–1208. https://doi.org/10.30970/jps.25.1201

Капустяник В. Термохромні властивості нано- та мікрокомпозитів на основі кристалів (NH2(C2H5)2)2CuCl4 / В. Капустяник, Ю. Чорній, С. Семак // Журнал фіз. дослідж. – 2020. – Т. 24. – С. 4707–4713. https://doi.org/10.30970/jps.24.4707

Kapustianyk V. Structure and magnetic properties of [(CH3)3NH]MnCl3×2H2O crystals / V. Kapustianyk, Yu. Chornii, P. Demchenko, E. Khatsko // J. Phys. Stud. – 2021. – V. 25. – P. 2701-2704. https://doi.org/10.30970/jps.25.2701

Коломієць В.А. Структурні, електронні та оптичні властивості неорганічного перовскіта CsPbBr3: першопринципне дослідження / В.А. Коломієць, М.В. Коваленко, В.Б. Капустяник, О.В. Бовгира // Матеріали та програма Міжнародної науково-технічної конференції студентів та молодих вчених (ФЕЕ-2021), Суми, 19-23 квітня 2021 р. – С.35-36.

Коваленко М. Структурні, електронні та оптичні властивості CH3NH3PbBr3: розрахунок з перших принципів / М. Коваленко, О. Бовгира, О. Козаченко // Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів: матеріали конференції (ІЕФ -2021), Ужгород, 26-28 травня 2021. – С. 82.

Чорній Ю. Температурна еволюція абсорбційних спектрів сегнетоеластоелектрика тетрахлоркупрату амонію дигідрату // Ю. Чорній, В. Капустяник, С. Семак, М. Рудко, А. Васьків // Тези доп. Міжнародної конференції молодих учених та аспірантів, Ужгород, 26-28 травня 2021. – С.74.

Rudko M. X-ray luminescence spectra of undoped Ga2O3 crystal M. Rudko, V.Kapustianyk, V.Mykhailyk. Тези доп. Міжнародної конференції молодих учених та аспірантів, Ужгород, 26-28 травня. – С. 119-120.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович
д. філос. н.

Перелік осіб-виконавців

Бовгира Олег Вікторович
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Еліяшевський Юрій Ігорович
(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Коваленко Марія Василівна
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Козаченко Олег Володимирович

Мостовой Устим Романович

Рудко Микола Степанович

Семак Світлана Ігорівна
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Чорній Юрій Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів Капустяник Володимир Богданович

Телефон +38 (097) 482-99-91

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

