

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U002448

Державний реєстраційний номер: 0119U100357

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Структурно-композиційні закономірності та механізми мультифункціональності ковалентно-сіткових нанокомпозитів на основі ХС, ХГС та БС, викликані їх високоенергетичною механохімічною активацією та впровадженням РЗ-йонів.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізичної оптики імені О.Г. Влоха Міністерства освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 19173602

Місцезнаходження: Драгоманова, 23, м. Львів, Львівська обл., 79005, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322611488

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, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444814763

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1006.700

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Мультифункціональні наноструктуровані сіткові композити на основі склуватих халькогенідів, халькогалогенідів та боратів

Назва роботи англійською:

Multifunctional nanostructured network composites based on glassy chalcogenides, chalcogenhalogenides and borates

Реферат українською:

Досліджені ефекти власного і домішкового наноструктурування в ковалентно-сіткових склуватих композитах (КССНК) на основі халькогенідів (СХ), халькогалогенідів (СХГ) та боратів (СБ), в т.ч. викликані впровадженням металічних модифікаторів (спів-активаторів) та рідкісноземельних (РЗ) активаторів, проведено їх мікроструктурну та оптичну характеризацію, зокрема: - синтезовано та підготовлено взірці домішково-модифікованих КССНК на основі СХ типу As/Ge-S/Se-Ga, СХГ GeS₂-Ga₂S₃-CsCl, СБ типу Li₂B₄O₇:(Gd,Cu,Ag), а також кераміки LiB₃O₅; - використовуючи програмний пакет "Hyper-Chem" в підході катіон-пов'язаних сіткових кластерів, проведено квантово-хімічне моделювання "від перших принципів" і отримано характеристики оптимізованих сіткових та молекулярних нанокластерів в метал-активованих КССНК на основі базових систем СХ і СХГ; - вивчено ефекти власного (механохімічно-активованого) та домішкового наноструктурування в модифікованих КССНК на основі СХ типу As/Ge-S/Se-Ga, СХГ CsCl-GeS₂-Ga₂S₃ та СБ Li₂B₄O₇:Ag; встановлено особливості впровадження Ga в СХ As/Ge-S/Se, CsCl в СХГ GeS₂-Ga₂S₃, Ag і Cu в СБ Li₂B₄O₇; досліджено їх мікроструктуру методами ХПД-ПГДП (Х-променевої дифрактометрії першого гострого дифракційного піку), ОС (оптичної спектрофотометрії) та ПЕАС (позитронно-електронної анігіляційної спектроскопії); - на основі систематичного вивчення оптико-люмінесцентних характеристик, відпрацьовано технологію домішкового наноструктурування та підготовлено функціонально оптимізовані взірці КССНК на основі Ga-модифікованих систем СХ типу As₂Se₃-Te активованих празеодимом (Pr³⁺), СХГ 65GeS₂-25Ga₂S₃-10CsCl активованих ербієм Er³⁺ та Ag-модифікованих СБ Li₂B₄O₇ активованих ербієм (Er³⁺), тулієм (Tm³⁺) та/чи неодимом (Nd³⁺). Обґрунтована методологія створення нанонеоднорідностей в КССНК на основі СХ, СХГ та СБ з оптимізованими функціональними характеристиками для оптоелектроніки, фотоніки, сенсорної та оптотелекомунікаційної техніки.

Реферат англійською:

The effects of intrinsic and impurity nanostructuring in covalent network glass composites (CNGNC) based on chalcogenides (GC), chalcogenhalides (GCH) and borates (GB) were studied, including caused by the introduction of metal modifiers (co-activators) and rare earth (RE) activators, their microstructural and optical characterization was carried out, in particular: - synthesized and prepared samples of impurity-modified CNGNC based on GC type As/Ge-S/Se-Ga, GCH GeS₂-Ga₂S₃-CsCl, GB type Li₂B₄O₇:(Gd,Cu,Ag), as well as LiB₃O₅ ceramics; - using the software package "Hyper-Chem" in the approach of cation-linked network clusters, quantum-chemical modeling was carried out "from the first principles" and the characteristics of optimized network and molecular nanoclusters in metal-activated CNGNC based on the basic systems of GC and GCH were obtained; - the effects of intrinsic (mechanochemically activated) and impurity nanostructuring in modified CNGNC based on GC As/Ge-S/Se-Ga, GCH CsCl-GeS₂-Ga₂S₃ and GB Li₂B₄O₇:Ag were studied; the specifics of the introduction of Ga into GC As/Ge-S/Se, CsCl into GCH GeS₂-Ga₂S₃, Ag and Cu into GB Li₂B₄O₇ have been established; their microstructure was investigated using X-ray diffractometry of the first sharp diffraction peak, optical spectrophotometry and positron-electron annihilation spectroscopy; - on the basis of systematic study of optical-luminescence characteristics, the technology of impurity nanostructuring was worked out and functionally optimized samples of

CNGNC were prepared based on Ga-modified GC systems of the As₂Se₃-Te type activated by praseodymium (Pr³⁺), GCH 65GeS₂-25Ga₂S₃-10CsCl activated by erbium Er³⁺ and Ag-modified GB Li₂B₄O₇ activated with erbium (Er³⁺), thulium (Tm³⁺) and/or neodymium (Nd³⁺). A methodology for the creation of nanoinhomogeneities in CNGNC based on GC, GCH and GB with optimized functional characteristics for optoelectronics, photonics, sensor and opto-telecommunication technology was substantiated

Індекс УДК: 535.343.2 , 539.213.2:535.8

Коди тематичних рубрик: 29.31.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Шпотюк Олег Йосипович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

Erika Dutková, Zdenka Lukáčová Bujňáková, Oleh Shpotyuk, Jana Jakubíková, Danka Cholužová, Viera Šišková, Nina Daneu, Matej Baláž, Jaroslav Kováč, Jaroslav Kováč Jr., Jaroslav Briančin, Pavlo Demchenko, SDS-Stabilized CuInSe₂/ZnS Multinano-composites Prepared by Mechanochemical Synthesis for Advanced Biomedical Application // Nanomaterials, 2021, v. 11, Is. 1, p. 69-1-19. <https://doi.org/10.3390/nano11010069>

Oleh Shpotyuk, Malgorzata Hyla, Yaroslav Shpotyuk, Valentina Balitska, Vitaliy Boyko, Computational insight on molecular-network disproportionality in over-stoichiometric As_xS_{100-x} nanoarsenicals (57<x<67) // Computational Materials Science, 2021, v. 198, p. 110715-1-9. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110715>

Oleh Shpotyuk, Roman Golovchak, Yaroslav Shpotyuk, Andriy Kovalskiy, On the paradigm of physical aging in stoichiometric As₂Se₃ glass as illusory manifestation of anti-aging ability in optimally-constrained covalent networks // Coordination Chemistry Reviews, 2021, v. 449, p. 214211-1-5. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2021.214211>

Mykhaylo Shpotyuk, Oleh Shpotyuk, On the glass-transition temperature T_g in chalcogenide glass-forming systems: critical assessment on compositional changes within covalent bond approach // Physica B: Physics of Condensed Matter, 2021, v. 603, p. 412720-1-7. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412720>

Andriy Kovalskiy, Joshua A. Allen, Roman Golovchak, Justin Oelgoetz, Oleh Shpotyuk, Miroslav Vlcek, Karel Palka, Parameterization of photobleaching and photodarkening in-situ kinetics in thermally deposited GeSe₂ thin films // Thin Solid Films, 2021, v. 726, p.138659-1-8. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2021.138659>

Oleh Shpotyuk, Andrzej Kozdras, Sergey Kozyukhin, Yaroslav Shpotyuk, Józef Cebulski, Zdenka Lukáčová Bujňáková, Peter Baláž, Probing calorimetric heat transfer phenomena in multi-nanophase substances: a case study of some over-stoichiometric nanoarsenicals // Thermochimica Acta, 2021, v. 701, p. 178955-1-10. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2021.178955>

Yaroslav Shpotyuk, Pavlo Demchenko, Oleh Shpotyuk, Valentina Balitska, Catherine Boussard-Pledel, Bruno Bureau, Zdenka Lukáčová Bujňáková, Peter Baláž, High-energy mechanical milling-driven reamorphization in glassy arsenic monoselenide g-AsSe: on the path tailoring special molecular-network glasses // Materials, 2021, v.

14, p. 4478-1-14. <https://doi.org/10.3390/ma14164478>

Ihor I. Kindrat, Bohdan V. Padlyak, Radosław Lisiecki, Volodymyr T. Adamiv / Spectroscopic and luminescent properties of the lithium tetraborate glass co-doped with Nd and Ag // Journal of Alloys and Compounds, 2021, v. 853, p. 157321. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157321>

B.V. Padlyak, I.I. Kindrat, A. Drzewiecki, V.I. Goleus, Y.S. Hordieiev / Spectroscopic properties and intrinsic photoluminescence of the un-doped lead borate glasses // Journal of Non-Crystalline Solids, 2021, v. 557, p. 120631. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2020.120631>

Zoe G. Marzouk, Archit Dhingra, Yaroslav Burak, Volodymyr Adamiv, Ihor Teslyuk, Peter A. Dowben / Long carrier lifetimes in crystalline lithium tetraborate // Materials Letters, 2021, v. 297, p. 129978. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129978>

I. Blonskyi, V. Kadan, I. Pavlov, O. Shpotyuk, A. Dmytruk, A. Rybak, P. Korenyuk. Laser-induced periodic volume structures in glassy As₂S₃ // Materials of Scientific and Technical Conf. "Laser Technologies. Lasers and their Application". Truskavets, Ukraine. June 29 – July 1, 2021. P. 17.

Y. Shpotyuk, B. Mahlovanyi, J. Cebulski, O. Shpotyuk, A. Ingram. Atomic-deficient nanostructurization in rare-earth doped glassy chalcogenides probed by annihilating positrons // 18th Intern. Conf. on Nanosciences & Nanotechnol. "NN21". Greece, Thessaloniki: 6-9 July 2021. P. 155.

Х. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Влох Ростислав Орестович
д. ф.-м. н., 01.04.05

Перелік осіб-виконавців

Адамів Володимир Теодорович
(д. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.07)

Бойко Віталій Теодорович
(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Дудок Тарас Григорович
(к. ф.-м. н., 01.04.05)

Падляк Богдан Володимирович
(д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.05)

Теслюк Ігор Михайлович
(01.04.07)

Шпотюк Олег Йосипович
(д.ф.-м.н., професор, 01.04.07)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Костирко Мирослав Євгенійович

Телефон

+38 (032) 261-14-88

Реєстратор

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна