

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U003139

Державний реєстраційний номер: 0122U001806

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-03-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Ефекти наноструктурування в немодифікованих ковалентно-сіткових склуватих системах (КССС) на основі халькогенідів, халькогалогенідів та боратів

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього 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: 0207090087

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2324210

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): 2021040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1053.430

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Ефекти наноструктурування як новітня інноваційна платформа мультифункціональності прогресивних ковалентно-сіткових склуватих систем

Назва роботи англійською:

Effects of nanostructuring as the newest innovative platform of multifunctionality of advanced covalent-network glass systems

Реферат українською:

Досліджено ефекти власного наноструктурування ковалентно-сіткових склуватих систем (КССС) на основі халькогенідних, халькогалогенідних і боратних стеклол (ХС, ХГС та БС), викликані їх високо-енергетичною механохімічною активацією, проведено їх структурну та оптичну характеристику, зокрема: - синтезовано та підготовлено зразки КСС на основі ХС типу $As_x(S/Se)_{100-x}$ з області склування, ХГС типу $(GeS_2-Ga_2S_3)-CsCl$ (в т.ч. $65GeS_2-25Ga_2S_3-10CsCl$) та БС змінно-катионного ряду $Li_2B_4O_7-CaB_4O_7-LiKB_4O_7$ (в т.ч. тетраборату літію $Li_2B_4O_7$); досліджено їх мікроструктуру (методами ХПД-ПГДП, ОСФ, ПЕАС); - з використанням програмного пакету "Hyper-Chem", проведено квантово-хімічне моделювання "від перших принципів" внутрішньо-структурних неоднорідностей в ХС, ХГС та БС, визначено оптимальні склади їх формуючих матриць для впровадження активаторів; - вивчено ефекти власного наноструктурування в КССС, викликані їх високоенергетичною механоактивацією, параметризовано експлуатаційні властивості механоактивованих КССС; - запропоновано феноменологічну конфігураційно-ентропійну модель власного наноструктурування в КССС на основі ХС $As-S/Se$, ХГС $(GeS_2-Ga_2S_3)-CsCl$ та БС типу $Li_2B_4O_7$. Обґрунтована методологія створення-формування-стабілізації-функціонування наноструктурних неоднорідностей в КССС на основі ХС, ХГС та БС з оптимізованими характеристиками для оптоелектроніки, фотоніки, сенсорної та оптотелекомунікаційної техніки.

Реферат англійською:

The effects of self-nanostructuring of covalent network glass systems (CNGS) based on chalcogenide, chalcohalide, and borate glasses (CG, CHG, and BS) caused by their high-energy mechanochemical activation were investigated, and their structural and optical characterization was carried out, in particular: - synthesized and prepared CNGS samples based on $As_x(S/Se)_{100-x}$ type CG from the glass transition region, $(GeS_2-Ga_2S_3)-CsCl$ type (including $65GeS_2-25Ga_2S_3-10CsCl$) and BG of the alternating-cation series $Li_2B_4O_7-CaB_4O_7-LiKB_4O_7$ (including lithium tetraborate $Li_2B_4O_7$); their microstructure was investigated (by the methods of XRD-FSDP, OSP, PEAS); - with the use of the "Hyper-Chem" software package, quantum-chemical modeling "from the first principles" of internal structural inhomogeneities in CG, CHG and BG was carried out, the optimal compositions of their forming matrices for the introduction of activators were determined; - the effects of self-nanostructuring in CNGS caused by their high-energy mechanoactivation were studied, the operational properties of mechanically activated CNGS were parameterized; - a phenomenological configuration-entropy model of intrinsic nanostructuring in CNGS based on $As-S/Se$ CG, $(GeS_2-Ga_2S_3)-CsCl$ CHG and $Li_2B_4O_7$ -type BG is proposed. A methodology for the creation-formation-stabilization-functioning of nanostructural inhomogeneities in CNGS based on CG, CHGS and BG with optimized characteristics for optoelectronics, photonics, sensor and opto-telecommunications technology was substantiated.

Індекс УДК: 544.23, 621.373, 539.213.2

Коди тематичних рубрик: 31.15.21.09, 47.09.48

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

Oleh Shpotyuk, Adam Ingram, Catherine Boussard-Pledel, Bruno Bureau, Zdenka Lukáčová Bujňáková, Peter Baláž, Bohdan Mahlovanyi, Yaroslav Shpotyuk. The Art of Positronics in Contemporary Nanomaterials Science: a Case Study of Sub-nanometer Scaled Glassy Arsenoselenides. – Materials, 2022, v. 15, p. 302-1-24.
<https://doi.org/10.3390/ma15010302>

James Forsythe, Mykhaylo Shpotyuk, Oleh Shpotyuk, Roman Golovchak. On the temperature behavior of optical gap in arsenic sulphide glasses. – Physica Status Solidi B, 2022, v. 259, Is. 1, p. 2100404-1-5.
<https://doi.org/10.1002/pssb.202100404>

O. Shpotyuk, M. Hyla, V. Boyko, Y. Shpotyuk, V. Balitska. Cluster modeling of nanostructurization-driven reamorphization pathways in glassy arsenoselenides: a case study of arsenic monoselenide g-AsSe. – Journal of Nanoparticle Research, 2022, v. 24, p. 64-1-12. <https://doi.org/10.1007/s11051-022-05447-x>

Olha Shpotyuk, Adam Ingram, Dmytro Slobodzyan, Oleh Shpotyuk, Jacek Filipecki, Yaroslav Shpotyuk, Comparative study of free volume changes in light cured (dimeth)acrylate type dental resin composites affected to artificial aging in dry air and water immersed mode. – Applied Nanoscience, 2022, v. 12, p.449-457.
<https://doi.org/10.1007/s13204-021-01681-2>

Oleh Shpotyuk, Malgorzata Hyla, Yaroslav Shpotyuk, Valentina Balitska, Andrzej Kozdras, Vitaliy Boyko, Cluster modeling of network-forming amorphization pathways in As_xS_{100-x} arsenicals (50≤x≤57) driven by nanomilling. – Journal of Cluster Science, 2022, v. 33, p. 1525-1541. <https://doi.org/10.1007/s10876-021-02077-6>

Oleh Shpotyuk, Adam Ingram, Jacek Filipecki, Yaroslav Shpotyuk, Jozef Cebulski, Zdenka Lukáčová Bujňáková, Peter Baláž, Volumetric nanostructurization in glassy arsenoselenides driven by high-energy mechanical dry- and wet-milling. – Macromolecular Symposia, 2022, v. 405, p. 2100253-1-6. <https://doi.org/10.1002/masy.202100253>

O. Shpotyuk, V. Adamiv, I. Teslyuk, A. Ingram, Y. Shpotyuk, Towards guided metallic ions migration in network glass-formers: The Positronics approach in application to lithium tetraborate glass. – Solid State Sciences, 2022, v. 134, p. 107051-1-8. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2022.107051>

Ihor Kindrat, Bohdan V. Padlyak, Radosław Lisiecki, Adam Drzewiecki, Volodymyr T. Adamiv, Effect of silver co-doping on luminescence of the Pr³⁺-doped lithium tetraborate glass. – Journal of Luminescence, 2022, v. 241, 118468. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2021.118468>

Ya.V. Burak, V.T. Adamiv, I.M. Teslyuk, I.E. Moroz, S.Z. Malynych, What is the true value of bulk band gap of lithium tetraborate single crystal? – Physics and Chemistry of Solid State, 2022, v. 23, No. 1, p. 113-119.
<https://doi.org/10.15330/pcss.23.1.113-119>

Timothy Gustafson, Brant Kananen, Nancy Giles, Brian Holloway, Volodymyr Adamiv, Ihor Teslyuk, Yaroslav Burak, Larry Halliburton / Electron traps in Ag-doped Li₂B₄O₇ crystals: The role of Ag interstitial ions // Journal of Applied Physics, 2022, v. 131, p. 175106. <https://doi.org/10.1063/5.0088122>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мельник Володимир Петрович

д. філ. н., 09.00.01

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)

Теслюк Ігор Михайлович

(01.04.07)

Шпотюк Олег Йосипович

(д.ф.-м.н., професор, 01.04.07)

Шпотюк Ярослав Олегович

(к. ф.-м. н., с.д., 01.04.07)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Костирко М.Є.

Телефон

+38 (032) 261-14-88

Реєстратор

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна