

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U000198

Державний реєстраційний номер: 0120U102245

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Ефективні екологічно безпечні термоелектричні матеріали в багатокомпонентних селенідних системах

Початок етапу: 04.2020

Закінчення етапу: 12.2022

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 Перемоги, 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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1000.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Ефективні екологічно безпечні термоелектричні матеріали в багатокомпонентних селенідних системах.

Назва роботи англійською:

Effectively ecologically safe thermoelectric materials in multicomponent selenide systems.

Реферат українською:

Вперше методом DFT розрахований коефіцієнт теплопровідності для Cu_7PS_6 , що є співрозмірним з експериментальними даними, який отриманий для індивідуальних сполук та твердих розчинів системи $\text{Cu}_7\text{PS}_6\text{--Cu}_7\text{PSe}_6$. Проведено експериментальні дослідження температурної залежності коефіцієнта Зеебека, встановлено, що максимальні значення фактору потужності спостерігаються для сполуки Cu_7PSe_6 (від 2.9 до $7.4 \mu\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}^2$). Вперше досліджено зразки твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{PSe}_6$ методом спектроскопії дифузного відбиття у спектральному діапазоні 220–1400 нм. За результатами проведених досліджень проведено оцінку значень ширини псевдозабороненої зони, що здійснювалася за допомогою графічного методу Таука, застосованого до перетворених спектрів дифузного відбиття за допомогою функції Кубелки-Мунка. Вперше методом імпедансної спектроскопії досліджено електричні параметри одержаних монокристалічних зразків вихідних сполук (Ag_7PSe_6 , Cu_7PSe_6) та твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{PSe}_6$. Встановлено, що досліджувані зразки належать до електронно-іонних провідників із значним переважанням електронної складової. Проведено дослідження температурної залежності коефіцієнта Зеебека, встановлено, що максимальні значення коефіцієнту термоелектричної добротності спостерігаються для монокристалічного зразка твердого розчину складу $(\text{Cu}_{0.66}\text{Ag}_{0.34})_7\text{PSe}_6$ (ρ від -700 до $-450 \mu\text{V}/\text{K}$). За результатами XPS підібрано модель розрахунку оптичних характеристик кристалів $\text{Ag}(\text{Tl})\text{Sb}(\text{Bi})\text{P}_2\text{Se}_6$, що вказують на їх значну анізотропію та поглинання ними електромагнітного випромінювання у широкому оптичному діапазоні 2–18 еВ. Встановлено, що досліджені сполуки селеногіподифосфатів відносяться до непрямозонних напівпровідників та характеризуються значною анізотропією оптичних констант, що робить їх перспективними для застосування у приладах оптоелектроніки для ІЧ області спектрального діапазону.

Реферат англійською:

For the first time, the thermal conductivity coefficient for Cu_7PS_6 was calculated using the DFT method, which is commensurate with the experimental data obtained for individual compounds and solid solutions of the $\text{Cu}_7\text{PS}_6\text{--Cu}_7\text{PSe}_6$ system. It was determined that high values of power factor are observed for the compound Cu_7PSe_6 (2.9 – $7.4 \mu\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}^2$). The diffuse reflection spectra of $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{PSe}_6$ solid solutions samples in the 220 – 1400 nm spectral range were investigated at first time. The optical band gap values were calculated using the Tauc plot, applied to the transformed diffuse reflectance spectra with the help of the Kubelka-Munk function. The electrical parameters of the grown single crystal samples were investigated by the method of impedance spectroscopy, at first time. It was established that the studied samples belong to electron-ion conductors with a significant predominance of the electronic component. Temperature dependence of the Seebeck coefficient were investigated, it was established that the figure of merit maximum values is observed for a $(\text{Cu}_{0.66}\text{Ag}_{0.34})_7\text{PSe}_6$ single crystalline sample (ρ from -700 to $-450 \mu\text{V}/\text{K}$). Based on XPS results, a model for calculating the optical characteristics of $\text{Ag}(\text{Tl})\text{Sb}(\text{Bi})\text{P}_2\text{Se}_6$ crystals was selected, indicating their anisotropy and absorption of electromagnetic radiation in a wide optical range of 2–18 eV. It was established that the studied seleno-hypodiphosphates belong to indirect bandgap semiconductors and are characterized by significant anisotropy of optical constants, which makes them promising for use in optoelectronic devices for the IR region.

Індекс УДК: 546;54–386, УДК 546.057:546.06:546.03 +544.015.3[546.55/.59/.85/.86/.87/.23]

Коди тематичних рубрик: 31.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Барчій Ігор Євгенович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Екологічно безпечні матеріали на основі евтектичних композитів.

Назва НТП англійською: Ecologically safe materials on the basis of eutectic composites.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Енергетика. Екологія.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Електричні та оптичні характеристики кристалів AgPSe_6 і Cu_7PSe_6 та твердих розчинів $(\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x)_7\text{PSe}_6$ є сприятливими для створення сучасних ефективних екологічно безпечних термоелектричних пристроїв, які володіють високою технологічністю та не піддаються деградації при підвищеній відносній вологості повітря. В результаті проведених розрахунків електронних, фононних і термоелектричних властивостей кристала індивідуальної тернарної фази Cu_7PS_6 в рамках теорії функціоналу густини, встановлено, що розрахований коефіцієнт теплопровідності для Cu_7PS_6 є співрозмірним з експериментальним $\text{пексп} = 0.2 \pm 0.3 \text{ Вт}/(\text{м} \times \text{К})$, який отриманий для індивідуальних сполук та твердих розчинів системи Cu_7PS_6 – Cu_7PSe_6 . Показник $ZT > 0.1$ для Cu_7PS_6 вказує на значний практичний інтерес.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів

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

Barchiy I., Sabov M., Pavlyuk V., Stetskiv A., Marciniak B., Różycka-Sokołowska E., Sabov V. New quaternary selenides $\text{Ti}_4\text{Sb}_8\text{Sn}_5\text{Se}_{24}$ and $\text{Ti}_5\text{Sb}_2\text{Sn}_4\text{Se}_{14-x}$ ($x=0.5$). Zeitschrift für Kristallographie. Crystalline Materials. 2020. 235 (3). 59-68. DOI: <https://doi.org/10.1515/zkri-2020-0004>

Tuan V.Vu, Lavrentyev A.A., Gabrelian B.V., Dat D.Vo., Sabov V.I., Sabov M.Yu., Barchiy I.E., Piasecki M., Khyzhun O.Y. Highly anisotropic layered selenophosphate $\text{AgSbP}_2\text{Se}_6$: The electronic structure and optical properties by experimental measurements and first-principles calculations. Chemical Physics. 2020. 536. (Available online 20 April 2020). 110813. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2020.110813>

Studeniyak I.P., Pogodin A.I., Luchynets M.M., Filep M.Y., Kohutych A.A., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Sabov M.Y., Kúš P. Influence of heterovalent substitution on structural, electrical and thermoelectric properties of $\text{Cu}_{7-x}\text{PS}_6\text{-xBr}_x$ solid solutions // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2021. Vol. – 150, №. 109855. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2020.109855>

Pogodin A.I., Kokhan O.P., Barchiy I.Ye., Studeniyak I.P. Phase equilibria in $\text{Cu}_2\text{S-CuBr(I)-P}_2\text{S}_5$ systems. Copper and Silver Containing Superionic Conductors: Preparation, Structure and Physical Properties: monograph / Ed. by Ihor Studeniyak, Vladimir Lisý. Košice: Technical University of Košice, 2020. P. 6-59. ISBN: 978-80-553-3650-3. Кількість друк. Арк: 3.08.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Миронюк Іван Святославович
д.мед.н., 01.04.07

Перелік осіб-виконавців

Малаховська Тетяна Олександрівна
(к. х. н.)

Погодін Артем Ігорович
(к.х.н.)

Сабов Вікторія Іванівна

Сабов Мар'ян Юрійович
(к.х.н., 02.00.01)

Стерчо Іванна Петрівна
(к.х.н.)

Філеп Михайло Йосипович
(к. х. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Фречка Н.І.

Телефон

+38 (050) 148-61-31

Реєстратор

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

