Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U003087

Державний реєстраційний номер: 0122U000944

Відкрита

Дата реєстрації: 05-04-2024

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вироблення концепції напрямленої зміни складу матеріалів для збільшення їх нелінійно-оптичних та фотолюмінесцентних ефективностей.

Початок етапу: 01-2023

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02125102

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: проспект Волі, буд. 13, м. Луцьк, Луцький р-н., Волинська обл., 43025, Україна

Телефон: 380332720127

Телефон: 380332241007

E-mail: post@vnu.edu.ua

WWW: https://vnu.edu.ua/

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02125102

Адреса: проспект Волі, буд. 13, м. Луцьк, Луцький р-н., Волинська обл., 43025, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380332720127

Телефон: 380332241007

E-mail: post@vnu.edu.ua

WWW: https://vnu.edu.ua/

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 450.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Оптико-спектральні властивості РЗМ-вмісних халькогенідів

Назва роботи (англ)

Optical-Spectral Properties of REM-containing Chalcogenides

Реферат (укр)

В межах проекту заплановано дослідження потенціалу пруститу (Ag3AsS3) та піраргіриту (Ag3SbS3) легованого f-, p- та d-елементами для використання їх в якості нелінійно-оптичних матеріалів, які працюють в інфрачервоному діапазоні. Буде широко досліджено оптичне поглинання, фотолюмінесценція, нелінійно-оптичні та фотоіндуковані властивості, встановлена кристалічна структура. Для найбільш перспективних фаз буде розроблено технологію одержання кристалів великого розміру та рекомендації для практичного використання. Легування впливає на фізико-хімічні властивості фаз шляхом часткової заміни елементів та може призводити як до значних структурних змін так і до покращення їх фізико-хімічних характеристик. Комплексне дослідження даних параметрів дозволить отримати нові, багатофункціональні матеріали для оптоелектронної техніки, які мають перспективу використання як активних так і пасивних середовищ при розробці тригерів, які будуть керовані зовнішнім оптичним полем, а також при конструюванні лазерних модулів, дальномірів, систем наведення у сучасній військовій техніці, які працюють в інфрачервоному спектральному діапазоні.

Реферат (англ)

The project plans to study the potential of prustite (Ag3AsS3) and pyrargyrite (Ag3SbS3) doped with f-, p- and d-elements for their use as nonlinear optical materials operating in the infrared range. Optical absorption, photoluminescence, nonlinear optical and photoinduced properties will be widely investigated, and the crystal structure will be established. For the most promising phases, the technology for obtaining large-sized crystals and recommendations for practical use will be developed. Doping affects the physicochemical properties of phases by partially replacing elements and can lead to both significant structural changes and improvement of their physicochemical characteristics. A comprehensive study of these parameters will allow to obtain new, multifunctional materials for optoelectronic technology, which have the prospect of using both active and passive media in the development of triggers that will be controlled by an external optical field, as well as in the design of laser modules, rangefinders, guidance systems in modern military equipment , which work in the infrared spectral range.

Індекс УДК: 539.216; 539.22; 538.91Ф405; 548; 620.18 , 539.21:539.12.04; 548:539.12.04; 538.95Ф405:539.12.04

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.19.04, 29.19.21

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Оптико-спектральні властивості РЗМ-вмісних халькогенідів

Назва продукції (англ): Optical-Spectral Properties of REM-containing Chalcogenides

Очікувані результати: Методи, теорії, Методичні документи

Галузь застосування: Освіта, наука, професійні об'єднання

Опис продукції (укр): Методом Бріджмена – Стокбаргера вирощено кристал Ag3SbS3. Встановлено особливості отримання монокристалу сполуки Ag3SbS3 (аналог природнього мінералу піраргіриту), що є перспективним матеріалом для нелінійної оптики. Досліджено його структуру та хімічний склад. Методами енергодисперсійної спектроскопії (EDS) та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (EDX) встановлено якісний та кількісний склад вирощеного монокристалу. Показано його хорошу якість та стехіометрію. Проведено експериментальне та теоретичне дослідження кристала піраргітиту з перших принципів за допомогою методу теорії функціоналу густини (DFT). Розрахунки перших принципів були виконані для кращого розуміння особливостей заповнення валентних зон і зон провідності конкретними електронними станами, а також природи забороненої зони цих сполук. Проведено дослідження та аналіз особливостей кристалічної структури, структури та походження електронних станів, оптичних спектрів. Здійснений розрахунок фононних спектрів. Встановлено, що низькочастотні коливання пов'язані з атомами Ag, тоді як середня частина спектр DOS формується атомами S з низьким внеском атомів Ag. Розрахована зонна структура показала, що досліджуваний кристал має заборонену зону непрямого типу. Отримано повну і парціальну густини електронних станів кристала Ag3SbS3. Розраховано спектральну залежність діелектричної функції та коефіцієнта поглинання і показано, що статична діелектрична функція у напрямку X є більшою за діелектричну функцію в напрямку Z. Встановлено, що введення РЗМ до матриці Ag3SbS3 сприяє зменшенню ширини забороненої зони синтезованих матеріалів. Внаслідок нецентросиметричності кристалічної структури Ag3SbS3 легування синтезованого піраргіриту рідкісноземельними металами викликає інтерес внаслідок потенційного його використання в електрооптичних та нелінійно-оптичних пристроях. З огляду на це нами проведено дослідження генерації другої гармоніки (ГДГ) в синтезованих матеріалах.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Забезпечення промисловості чи населення новим видом інформаційно-комунікаційних послуг

Стадія завершеності НТП: Ідея, концепція

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 01.202312.2023

Виробник продукції: Науковці ВНУ імені Лесі Українки

Споживачі продукції: Аспіранти, студенти, викладачі ВНУ імені Лесі Українки

Перспективні ринки: Ринки науково-технічної продукції

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Rudysh M.Ya., Myronchuk G.L., Fedorchuk A.O., Marchuk O.V., Kordan V.M., Kohan O.P., Myronchuk D.B., Smitiukh O.V. (2023). Electronic structure and optical properties of the Ag3SbS3 crystal. Physical chemistry chemical physics : PCCP. 25(34), 22900-22912. https://doi.org/10.1039/D3CP02333H

Umar, Z., Kurboniyon, M.S., Khyzhun, O., ...Brik, M.G., Piasecki, M. First-principles calculations of the electronic structure and mechanical properties of non-doped and Cr3+-Doped K2LiAlF6 under pressure. Journal of Luminescence, 2024, 266, 120278 https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2023.120278

Batouche, M., Seddik, T., Vu, T.V., ...Khyzhun, O.Y., Hieu, N.N. First-principles calculation of the electronic, optical, and photo-electrochemical properties of CaM2S4 (M = Sc, Y) compounds Materials Science in Semiconductor Processing, 2023, 164, 107600 https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107600

M.Y. Rudysh, P.A. Shchepanskyi, G.L. Myronchuk, M. Piasecki, O.S. Martyniuk, Vibrational, thermodynamic and acoustic properties of AgAlS2 crystal Physica B: Condensed Matter, 2023, 654, 414731. https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.414731

M.Y. Rudysh, A.O. Fedorchuk, M.G. Brik, J. Grechenkov, D. Bocharov, S. Piskunov, A.I. Popov, M. Piasecki, Electronic, Optical, and Vibrational Properties of an AgAlS2 Crystal in a High-Pressure Phase. Materials 2023, 16, 7017. https://doi.org/10.3390/ma16217017

Parashchuk T, Cherniushok O., Smitiukh O., Marchuk O., Wojciechowski K.T. (2023). Structure evolution and bonding inhomogeneity towards high thermoelectric performance in Cu2CoSnS4-xSex materials. Chem. Mater. 35(12), 4772-4785.

https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.3c00586

Tuan V. Vu, Vo D. Da, A. A. Lavrentyev, B. V. Gabrelian, Nguyen N. Hieu, G. L. Myronchuk and O. Y. Khyzhun Electronic and optical properties of thiogermanate AgGaGeS4: theory and experiment / RSC Adv., 2023, 13, 881-887 DOI: 10.1039/D2RA07639J

O.Y. Khyzhun, Tuan V. Vu, G.L. Myronchuk, M. Denysyuk, L.V. Piskach, A.O. Selezen, A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, A.O. Fedorchuk, V.A. Tkach, S.S. Petrovska, M. Piasecki Exploring particular electronic and optical properties of Tl2HgSnSe4, promising chalcogenide for solar photovoltaics and optoelectronics: A complex experimental and theoretical study / Journal of Alloys and Compounds 952 (2023) 170093 https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.170093

Кохан, О., Рудиш, М., Смітюх, О., Марчук, О. (2023). Синтез та структурна гомогенність піраргіриту. Проблеми хімії та сталого розвитку. 3, 26-31. https://doi.org/10.32782/pcsd-2023-3-4

Rudysh M.Ya., Smitiukh O.V., Myronchuk G.L., Ponedelnyk S.M., Marchuk O.V. (2023). Band structure calculation and optical properties of Ag3AsS3 crystal. Physics and chemistry of solid state. 24(1). 17-22. https://doi.org/10.15330/pcss.24.1.17-22

Smitiukh O., Soroka O., Marchuk O. (2023). Effect of the crystal structure and chemical bonding on the electronic and thermal transport in Cu2MeHf3S8 (Me – Mn, Fe, Co, Ni) thiospinels. Physics and chemistry of solid state. 24(2). 235-243. https://doi.org/10.15330/pcss.24.2.235-243

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 16

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Кириченко Максим Іванович (аспірант)

Марчук Олег Васильович (к. х. н., доц.)

Мельничук Христина Олегівна (к. х. н.)

Мирончук Галина Леонідівна (д. ф.-м. н., професор)

Рудиш Мирон Ярославович (к. ф.-м. н.)

Хижун Олег Юліанович (д.ф.-м.н., с.н.с.)

Шигорін Павло Павлович (к. х. н., доц.)

Янчук Олександр Миколайович (к. х. н., доц., старший науковий співробітник)

Яцинюк Тетяна Костянтинівна (аспірант)

Керівник організації:

Цьось Анатолій Васильович (д. фіз. вих., професор)

Керівники роботи:

Мирончук Галина Леонідівна (д. ф.-м. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.