

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U003799

Державний реєстраційний номер: 0122U000944

Відкрита

Дата реєстрації: 03-07-2023



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розроблення технології одержання полікристалічних та монокристалічних зразків піраргіриту та пруститу легованого р- та d-елементами. Встановлення концентраційних меж легування.

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітнього 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

Напрямок 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 (Ag_3AsS_3) та піраргіриту (Ag_3SbS_3) 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 (Ag_3AsS_3) and pyrargyrite (Ag_3SbS_3) 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): Аналіз рентгенограм вказує на те, що рідкоземельні елементи займають позиції Ag у структурі Ag₃AsS₃. EDXS аналіз показав, що всі зразки містять фазу з елементним складом, близьким до Ag₃AsS₃, в той же час спостерігалися слідові включення інших фаз на межах розділу зерен. Останнє пояснюється перевищенням меж твердої розчинності рідкоземельних елементів в Ag₃AsS₃ і підтверджує те, що атоми РЗ займають позиції Ag у структурі. Встановлено, що інтенсивність ГВГ у досліджуваних матеріалах зростає зі збільшенням вмісту легуючої домішки у всіх випадках, крім Yb. В останньому випадку інтенсивність ГВГ спочатку різко зростає, а потім дещо зменшується. Визначено, що такі тренди інтенсивності ГВГ корелюють зі зміною ширини забороненої зони. Встановлено, що введення рідкоземельних елементів до матриці Ag₃AsS₃ призводить до зменшення ширини забороненої зони синтезованих матеріалів. Водночас його величина залежить від атомного номера легуючої домішки. Розраховано повну та парціальну густини станів N(E) для внесків окремих атомів встановлено, що вершина валентної зони утворена 3р станами сірки, а дно зони провідності утворене 5s станами срібла та 3р станами сірки. При легуванні високим вмістом (1%) РЗ в спектрах КРС Ag₃AsS₃ були виявлені додаткові смуги при ~406 і ~415 см⁻¹. Їх поява в спектрах пов'язана зі збільшенням величини електрон-фононної взаємодії в кристалах Ag₃AsS₃, легуваних рідкоземельними елементами, що пояснює причину підвищеної інтенсивності ГВГ, яка спостерігається для досліджуваних матеріалів. Показано потенціал кристалів Ag₃AsS₃, легуваних рідкоземельними елементами, для нелінійно-оптичних застосувань в інфрачервоному діапазоні, наприклад, для перетворення ІЧ-променів у видиме світло.

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

Стадія завершеності НТП: Ідея, концепція

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 01.2022-12.2022

Виробник продукції: Науковці ВНУ імені Лесі Українки

Споживачі продукції: Аспіранти, науковці, 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

1. Smitiukh O.V., Marchuk O.V., Kogut Y.M., Yukhymchuk V.O., Mazur N.V., Myronchuk G.L., Ponedelnyk S.M., Cherniushok O.I., Parashchuk T.O., Khyzhun O.Y., Wojciechowski K.T., Fedorchuk A.O. Effect of rare-earth doping on the structural and optical properties of the Ag₃AsS₃ crystals. Optical and Quantum Electronics. 2022. Vol. 54 (4). Article number 224. <https://doi.org/10.1007/s11082-022-03542-w>
2. Vu Tuan V., Marchuk O.V., Smitiukh O.V., Tkach V.A., Myronchuk D., Myronchuk G.L., Khyzhun O.Y. High-temperature orthorhombic phase of Cu₂HgGeS₄: Electronic structure and principal optical constants as evidenced from the experiment and theory. Journal of Solid State Chemistry. 2022. Vol. 313. Article number 123313. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123313>
3. Cherniushok O., Smitiukh O., Tobola ., Knura R., Marchuk O., Parashchuk T., Wojciechowski K. Crystal Structure and Thermoelectric Properties of Novel Quaternary Cu₂MHf₃S₈(M-Mn, Fe, Co, and Ni) Thiospinels with Low Thermal Conductivity Chemistry of Materials. 2022. Vol. 34 (5), P. 2146 – 2160. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c03593>
4. Rudysh M. Ya., Ftomyn N.Y., Shchepanskyi P.A., Myronchuk G.L., Popov A.I., Lemée N., Stadnyk V.Y., Brik M.G., Piasecki M. Electronic Structure, Optical, and Elastic Properties of AgGaS₂ Crystal: Theoretical Study. Advanced Theory and Simulations. 2022. Vol. 5 (9). Article number 2200247. <https://doi.org/10.1002/adts.202200247>
5. Piasecki M., Myronchuk G., Khyzhun O.Y., Fedorchuk A., Andryievsky B., Barchyi I., Brik M. Impact of structure complexity on optoelectronic and non-linear optical properties in quaternary Ag(Pb)-Ga(In)-Si(Ge)-S(Se) systems. Journal of Alloys and Compounds. 2022. Vol. 909. Article number 164636. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.164636>
6. Rudysh M.Ya. Electronic structure, optical and elastic properties of AgAlS₂ crystal under hydrostatic pressure. Materials Science in Semiconductor Processing. 2022. Vol. 148, –P.106814. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.106814>

7. Smitiukh O., Marchuk O. The New Quaternary Compounds $R_3Ni_0.5SiS_7$ ($R = Y, Sm, La$) with $La_3Mn_0.5SiS_7$ Structure. Physics and chemistry of solid state. 2022. 23(4). 640–646.
8. Blashko N.M., Smitiukh O.V., Marchuk O.V. The crystal structure of $La_3Pb_0.1Ga_1.6S_7$ and $Pr_3Pb_0.1Ga_1.6S_7$ compounds. Physics and chemistry of solid state., 2022. 23(1). 96–100. <https://doi.org/10.15330/pcss.23.1.96-100>
9. Мирончук Г., Мельничук Т., Єндрика Я., Кажукаускас В. (2022). Оптичні та нелінійно-оптичні властивості кристалів $AgGaGeS_4$ легованих Er. Фізика та освітні технології. 2022. 1, С.41–47. <https://doi.org/10.32782/pet-2022-1-5>
10. Блашко Н., Марчук О., Федорчук А., Романюк Я. Кристалічна структура $Pr_3Hg_0.1Ga_1.67Se_7$. Проблеми хімії та сталого розвитку. 2022. 3. 13–18. <https://doi.org/10.32782/pcsd-2022-3-2>
11. Б. Горон, М. Рудиш, В. Стадник, Р. Брезвін, П. Щепанський, І. Матвіїшин. Вплив одновісного стискання на інфрачервоні спектри кристала $(NH_4)_2BeF_4$ / // Вісник Львівського університету. Серія фізична – 2022. – Вип. 59. – С. 53–60. <https://doi.org/10.30970/vph.59.2022.53>
12. М. Рудиш, Г. Мирончук, О. Рудиш Анізотропія пружних та акустичних властивостей кристалів $AgGaTe_2$ / Фізиката освітні технології. 2022. Т.1 С. 70–78. <https://doi.org/10.32782/pet-2022-1-9>

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 8

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Лучковська Алла Юріївна

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

Мельничук Христина Олегівна (к. х. н.)

Рудиш Мирон Ярославович (к. ф.-м. н.)

Смітюх Олександр Вікторович (к. х. н.)

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

Шваліковський Дмитро Миколайович (к. ф.-м. н.)

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

Шишко Тетяна Павлівна

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

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.