

# Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0222U005441

Державний реєстраційний номер: 0122U000445

Відкрита

Дата реєстрації: 30-12-2022



## 1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

**Назва етапу:** Прогнозування характеру взаємодії у системах оксид Бору – фторид металу на основі концепції кислотності-основності та термодинамічних розрахунків. Розробка методів аналітичного контролю.

**Початок етапу:** 01-2022

**Закінчення етапу:** 12-2022

**Вид звітного документа:** Проміжний звіт

## 2. Виконавець

**Назва організації:** Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 03534535

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Адреса:** Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

**Телефон:** 380487662044

**E-mail:** office.physchem@nas.gov.ua

**WWW:** <https://physchem.od.ua/>

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

**Назва організації:** Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 03534535

**Адреса:** Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Телефон:** 380487662044

**E-mail:** office.physchem@nas.gov.ua

**WWW:** <https://physchem.od.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:** 6541030

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

**Джерела фінансування**

**Джерело фінансування:** 7713 - кошти держбюджету

**Фактичний обсяг фінансування за звітний етап:** 2217.100 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Дослідження впливу кислотно-основної взаємодії на властивості систем оксид Бору – фторид металу II-IV груп Періодичної системи як основи матеріалів для інтерференційної оптики УФ, видимого та ІЧ діапазонів спектру

### Назва роботи (англ)

Investigation of the effect of acid-base interaction on the properties of systems Boron oxide– fluoride of metal of groups II-IV of the Periodic Table as the basis of materials for interference optics of UV, visible and IR spectral ranges

### Реферат (укр)

Об'єктом дослідження є кислотно-основна взаємодія у системах оксид Бору-фторид металу, її оцінка за концепцією електронегативності та термодинамічними розрахунками й прогнозування її можливого впливу на властивості матеріалів та одержуваних з них тонкоплівкових покриттів. Як метод дослідження застосовано термодинамічні розрахунки реакцій, які відбуваються між фторидом металу, наявною у ньому оксидною домішкою та добавкою оксиду Бору. Застосування останньої базується на уявленнях про кислотно-основну взаємодію між оксидом металу як домішкою та оксидом Бору, що призводить до утворення складної сполуки достатньої міцності для перешкоджання побічним реакціям оксидної домішки, зокрема, з матеріалами випарника у вакуумі. У той же час враховано можливість взаємодії (небажаної) оксиду Бору з самим фторидом металу за механізмом обмінної реакції з утворенням летких сполук типу оксофториду Бору. Термодинамічні розрахунки функцій за умовної температури вказують на неможливість такого роду реакцій за стандартних умов для усіх фторидів металів, окрім  $MgF_2$ . Для визначення ступеню взаємодії між оксидними домішками у фторидах та добавкою  $B_2O_3$  використано величини електронегативностей реагентів; встановлено якісну кореляцію між різницею електронегативностей та характером складних оксидів. Результати роботи будуть використані для оптимізації умов синтезу та проведення експериментальних досліджень зразків систем  $B_2O_3-MFx$  методами спектроскопії дифузного відбиття, ІЧ спектроскопії пропускання та подальших випробувань шляхом термічного випаровування у вакуумі. Застосування розроблених матеріалів у оптичному приладобудуванні сприятиме підвищенню авторитету вітчизняної науки і техніки, а також зміцненню обороноздатності держави.

### Реферат (англ)

The object of research is the acid-base interaction in Boron oxide-metal fluoride systems, its evaluation according to the concept of electronegativity and thermodynamic calculations, and the prediction of its possible influence on the properties of materials and thin film coatings obtained from them. As a research method, thermodynamic calculations of the reactions that occur between metal fluoride, the oxide impurity present in it, and boron oxide additive are used. The application of the latter is based on ideas about the acid-base interaction between metal oxide as an impurity and Boron oxide, which results in the formation of a complex compound of sufficient strength to prevent side reactions of the oxide impurity, in particular, with the materials of the evaporator in a vacuum. At the same time, the possibility of interaction (unwanted) of Boron oxide with the metal fluoride itself by the exchange reaction mechanism with the formation of volatile compounds of the boron oxofluoride type is taken into account. Thermodynamic calculations of the functions at standard temperature indicate the impossibility of this kind of reaction under standard conditions for all metal fluorides except  $MgF_2$ . Electronegativity values of reagents were used to determine the degree of interaction between oxide impurities in fluorides and  $B_2O_3$  additive; a qualitative correlation was established between the difference in electronegativities and the nature of complex oxides. The results of the work will be used to optimize the synthesis conditions and carry out experimental studies of samples of  $B_2O_3-MFx$  systems by the methods of diffuse reflection spectroscopy, IR transmission spectroscopy and further tests by thermal evaporation in a vacuum. The use of the developed materials in optical instrumentation will contribute to increasing the authority of domestic science and technology, as well as strengthening the state's defense capability.

**Індекс УДК:** 546 , 546.273-31 : 546.16 + 544.362

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 31.17.15

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Матеріал для інтерференційного покриття; матеріал для створення тонких омичних контактів до тонких плівок напівпровідникових матеріалів; проміжний звіт за темою.

**Назва продукції (англ):** Material for interference coating; material for creating thin ohmic contacts to thin films of semiconductor materials; interim report on the topic.

**Очікувані результати:** Матеріали

**Галузь застосування:** Оптичне приладобудування; напівпровідникова техніка та електроніка.

**Опис продукції (укр):** Проміжний звіт; спрямовано на створення матеріалів для оптики ультрафіолетового, видимого та інфрачервоного діапазонів спектру. Матеріал для інтерференційних покриттів оптики інфрачервоного діапазону спектру; склад Ge-GeO<sub>2</sub>-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Застосування в оптичному приладобудуванні та військовій техніці. Матеріал (TaOx) для створення тонких омичних контактів до тонких плівок напівпровідникових матеріалів. Застосування – у напівпровідниковій техніці та електроніці.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія матеріалів

**Стадія завершеності НТП:** Ідея, концепція, Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Строки впровадження:** 01.2022-12.2022

**Виробник продукції:** Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України.

**Споживачі продукції:** Підприємства оптичного приладобудування України.

**Перспективні ринки:** США, Ізраїль, країни Балтії.

**Права інтелектуальної власності:** Отримано патент, Подано заявку на видачу охоронного документу

**Форми та умови передачі продукції:** Продаж ліцензії, Спільні НДДКР

## 7. Бібліографічний опис

1. Зінченко В.Ф., Магунов І.Р., Вольчак Г.В., Соболев В.П., Горштейн Б.А., Мозкова О.В., Галькевич Є.П., Кочерба Г.І. Розвиток зв'язків «наука-виробництво» при створенні матеріалів для інтерференційної оптики. Наука та наукознавство – 2022. – № 2, Т. 116. – С. 114-123. <https://doi.org/10.15407/sofs.2022.02.114>

2. Зінченко В.Ф., Менчук В.В., Садковська Л.В. Електронегативність та сила кислот і основ у водних розчинах. Вісник ОНУ. Хімія. – 2022. – Т. 27, вип. 1 (81). – С. 39-48. [https://doi.org/10.18524/2304-0947.2022.1\(81\).255831](https://doi.org/10.18524/2304-0947.2022.1(81).255831)

3. Зінченко В.Ф., Менчук В. В., Садковська Л.В. Електронегативність як фактор стабілізації валентних станів у складних оксидах р- та d-елементів. Вісник ОНУ. Хімія. – 2022. – Т. 27, вип. 2 (82). – С. 35-41. [https://doi.org/10.18524/2304-0947.2022.2%20\(82\).264883](https://doi.org/10.18524/2304-0947.2022.2%20(82).264883)

4. Zinchenko V.F., Magunov I.R., Volchak G.V., Mozkova O.V., Kocherba G.I. Effect of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> additive on the properties of ZnS-Ge system and the resulting thin-film coatings. Materials Today: Proceedings, 2022. – V. 62, Part 9. – P. 5767-5770. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.03.477>

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 52

**Мова звіту:** Українська

**Кількість файлів у звіті:** 1

## 9. Заключні відомості

### Перелік осіб-виконавців

Єрьомін Олег Георгійович (к. х. н., н.с.)  
Вольчак Ганна Василівна (к. х. н., старший науковий співробітник)  
Дога Павло Геннадійович  
Желтвай Іван Іванович (к. х. н., с.н.с.)  
Зінченко Віктор Федосійович (д. х. н., професор)  
Кучер Альберт Олександрович  
Магунов Ігор Робертович (к. х. н., с.н.с.)  
Садковська Людмила Василівна  
Стамікосто Олена Володимирівна  
Стоянова Ірина Вікторівна (к. х. н., с.н.с.)  
Теслюк Ольга Іванівна (к. х. н., доц., старший науковий співробітник)  
Чвірева Наталія Олексіївна (к. х. н., с.н.с.)

### Керівник організації:

Кузьмін Віктор Євгенович (д. х. н., професор, член-кор.)

### Керівники роботи:

Зінченко Віктор Федосійович (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.