**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Вивчення електронної структури та фізико-хімічних властивостей потрійних та почетверених оксидних, халькогенідних і галогенідних фаз”**

**Мета роботи** - дослідження особливостей електронної структури, міжатомної взаємодії та оптичних характеристик низки оксидних, халькогенідних і галогенідних фаз для вдосконалення фізико-хімічних основ їх синтезу.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2017р.

 закінчення IV кв. 2019 р.

 **Керівник роботи**: Хижун Олег Юліанович, д.ф.м.н., (Email: Khyzhun@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

 Потрійні та почетверені кристалічні матеріали розглядаються наразі дослідниками в якості найперспективніших матеріалів для використання в детекторах гамма-променів, іон-селективних електродах, датчиках температур, пристроях для медичної візуалізації, частотних модуляторах тощо. Тому дослідження особливостей електронної будови та структурних характеристик кристалічних оксидних, халькогенідних і галогенідних матеріалів є безумовно актуальним завданням.

Авторами роботи встановлено, що поверхня кристалу CuHgSnSe4 чутлива до обробки іонами Ar" (3 кеВ). Встановлено, що основний внесок в валентну зону CupHgSnSe4 роблять Se4р стани (в основному в верхній і центральній частині), в той час як Sn 5s та Hg 6s переважають в нижній частині, а Hg 5d формують дно валентної зони. Зона провідності сформована переважно незайнятими Sn5s-станами з незначним внеском незайнятих Se 4р-станів. Показано, то Se 4р-стани гібридизуються з Си 4р та Cu 3d станами в верхній частині, з Cu 4s,4p,34 та Sn Sp-cтанами в нижній частині валентної зони. Встановлено, що такий вид гібридизації свідчить про значну ковалентну складову хімічного зв’язку CupHgSnSe4 на додачу до іонної. DFT розрахунки CuHgSnS4 показали, що основний внесок в валентну зону вносять S 3р стани (в основному в центральну та верхню частини), в той час як нижня частина сформована Hg 6s та Sn 5s станами, а Hg 5d стани переважають біля дна валентної зони. Дані DFT розрахунків дозволили авторам встановити, що почетверені сполуки CuHgSnSe4, Cu,HgSnS4 — прямозонні напівпровідники. Отримані результати дозволили зробити висновок про те, що дані почетверені селеніди можуть бути застосовані в оптоелектроніці.

Авторами показано, що монокристал Ag2HgSnSe4 чутливий до опромінення іонами Ar+, а саме зумовлює помітну модифікацію верхніх шарів, зменшуючи вміст атомів Hg B шарах. В роботі виявлено, що основний внесок в стелю та верхню частину валентної зони роблять Se 4р-стани, в той час як дно і центральна частина валентної зони сформовані переважно Hg 5d та Ag 4d-станами.

Дані виконаних в роботі теоретичних розрахунків добре узгоджуються з експериментально отриманими результатами.

Заплановані завдання авторами роботи виконані повністю, робота є завершеним дослідженням, проведеним на високому методичному рівні, а наведені в звіті результати стануть у нагоді при прогнозуванні властивостей нових функціональних матеріалів.

 **Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

 Роботи можуть бути використані для розробки рекомендацій щодо науково обгрунтованого керування властивостями кристалічних матеріалів з прогнозування та поліпшенням їх характеристик.

 Дані про реєстрацію роботи: № 0117U002203

 **РЕФЕРАТ**

**Об’єкти дослідження** – нанорозмірні матеріали, оксиди, халькогеніди, галогеніди.

**Мета роботи** – дослідження особливостей електронної структури, міжатомної взаємодії та оптичних характеристик низки оксидних, халькогенідних і галогенідних фаз для вдосконалення фізико-хімічних основ їх синтезу.

**Методи дослідження** – рентгенівська емісійна спектроскопія, рентгенівська фотоелектронна спектроскопія, першопринципні розрахунки.

Експериментальними і теоретичними методами досліджена електронна структура і оптичні властивості низки оксидних, халькогенідних і галогенідних фаз.

Відповідно до виконаних в роботі “першопринципних” зонних DFT-розрахунків гібридизація електронних рівнів свідчить про значну частину ковалентного типу хімічного зв’язку в сполуках А2HgSnB4 (A=Ag, Cu, B=Se, S) поряд із іонним зв’язком. Результати “першопринципних” DFT-розрахунків свідчать, що Br4p стани є основними у валентній зоні Tl4HgBr6, в той час як Tl6s і Hg6s стани роблять істотний внесок в нижній частині валентної зони, а Tl6s стани вносять значний вклад у верхній частині валентної зони Tl4HgBr6Ar+ іонне бомбардування поверхні монокристалів Tl4HgI6 та Tl10Hg3Cl16 істотно не змінює розподіл електронних станів в межах валентної зони вказаних сполук. **Ключові слова**: НАНОРОЗМІРНІ МАТЕРІАЛИ, ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА, ГАЛОГЕНІД, ХАЛЬКОГЕНІД, ОКСИД.

 **Публікації**

V.V. Atuchin, V.L. Bekenev, Yu.A. Borovlev, E.N. Galashov, O.Y. Khyzhun, A.S.

 Kozhukhov, L.D. Pokrovsky, V.N. Zhdankov Low thermal gradient Czochralski growth of large MWO4 (M = Zn, Cd) crystals, and microstructural and electronic properties of the (010) cleaved surfaces // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. – 2017. – Vol. 19. — P. 86-90. 2.

 O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun, M. Piasecki, I.V. Kityk, G. Lakshminarayana, I. Luzhnyi, P.M. Fochuk, A.O. Fedorchuk, S.I. Levkovets, O.M. Yurchenko, L.V. Piskach Synth structural, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) studies and IR induced anisotropy of TIGHgl, ѕinglе crystals // Mater. Chem. Phys. — 2017. – Vol. 187. — P. 156-163.

 L. Voisin, M. Ohtsuka, S. Petrovska, B. Ilkiv, R. Sergiienko Indium saving indium tin oxide thin films deposited by sputtering at room temperature // OXTT. – 2017.- T. 18, No1. - C. 69 75

M. Piasecki, G.L. Myronchuk, O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun, A.O. Fedorchuk, V.V. Lozer, V.P. Sachanyuk, A.M. El-Naggar, A.A. Albassam, J. Jedryka, I.V Kityk Synthesis, structural, electronic and linear electro-optical features of new quaternary Ag,Ga2SiS6 compound // J. Solid State Chem. — 2017. – Vol. 246. — P. 363-371.

 A.S. Krymus, I.V. Kityk, P. Demchenko, O.V. Parasyuk, G.L. Myronchuk, O.Y. Khyzhun, M. Piasecki AgGaSiSe4: Growth, crystal and band electronic structure, optoelectronic and piezoelectric properties // Mater. Rеѕ. Bull. – 2017. – Vol. 95. — P. 177—184.

 M.Y. Mozolyuk, L.V. Piskach, A.O. Fedorchuk, I.D. Olekseyuk, O.V. Parasyuk, O.Y. Khyzhun The Tl2S-PbS-SiS2 system and the crystal and electronic structure of quaternary chalcogenide TI,PbSiS4 // Mater. Chem. Phys. — 2017. – Vol. 195. — P. 132–142.

 O.Y. Khyzhun, O.V. Parasyuk, O.V. Tsisar, L.V. Piskach, G.L. Myronchuk, V.O. Levytskyy, V.S. Babizhetskyy New quaternary thallium indium germanium selenide ТIInGe,Ses: Crystal and electronic structure // J. Solid State Chem. — 2017. — Vol. 254. — P. 103–108.

 S.I. Levkovets, O.Y. Khyzhun, G.L. Myronchuk, P.M. Fochuk, M. Piasecki, I.V. Kityk, A.O. Fedorchuk, V.I. Levkovets, L.V. Piskach, O.V. Parasyuk Synthesis, electronic structure and optical properties of PbBr1.210.8 // J. Electron Spectrosc. Related Phenom. – 2017. – Vol. 218. — P. 13–20.

 S.V. Khalameida, M.N. Samsonenko, V.V. Sydorchuk, V.L. Starchevskyy, О.І. Zakutevskyy, O.Y. Khyzhun. Photocatalytic properties of tin dioxide doped with chromium(III), silver and zinc compounds in the oxidation of organic substrates by the action of visible light // Theoretical agd Experimental Chemistry. – 2017. – Vol. 53, No. 1. - Р. 40-46.

V. Strelchuk, O. Kolomys, S. Rarata, P. Lytvyn, O. Khyzhun, Chan Oeurn Chey, Omer Nur, Magnus Willander. Raman Submicron Spatial Mapping of Individual Mn-doped ZnO Nanorods // Nanoscale Res. Lett. –2017. – Vol. 12. –P. 351-361.

 А.А. Лаврентьев, Б.В. Габрельян, В.Т. By, П.Н. Шкумат, А.Б. Колпачев, Р.А. Ткач, О.В. Парасюк, О.Ю. Хижун Электронно-энергетическая структура Hg-содержащих галидов // Фазовые переходы, межфазные границы и нанотехнологии. —2017. – No 1. – С. 9–12.

 Б.В. Габрельян, А.А. Лаврентьев, Т.В. By, И.Я. Никифоров, В.А. Очеретова, О.В. Парасюк, О.Ю. Хижун. Моделирование электронной энергетической структуры Ag2HgSnS4 с различными вариантами упорядочения атомов Hg и Sn в подрешетке металлов // Фазовые переходы, межфазные границы и нанотехнологии. –2017. — No 3. — С. 35-40.