

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Директор Фізико-механічного інституту  
ім. Г.В. Карпенка НАН України

Зіновій Назарчук  
(Власне ім'я та ПІБ)

(підпис)

М.П.



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2021 році в рамках реалізації проєкту**  
**із виконання наукових досліджень і розробок**  
Експериментально-теоретичне вивчення і прогнозування фотопружних властивостей кристалічних матеріалів для пристроїв керування електромагнітним випромінюванням  
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: Конкурс НФДУ «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0211

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок Реєстраційний № 2020.02/0211 «Експериментально-теоретичне вивчення і прогнозування фотопружних властивостей кристалічних матеріалів для пристроїв керування електромагнітним випромінюванням»

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

## 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Загальна тривалість виконання проєкту 2020 рік – 2022 рік

Тривалість виконання Проєкту у 2021 році

Початок – 30.04.2021 р.  
(дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15.12.2021 р.

Загальна вартість Проєкту, грн. 6 013 800

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 930 000

2-й рік 2 532 200

3-й рік 2 551 600

## 2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 3 ;

кандидати наук 2 ;

інші працівники 1 .

### **3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

#### **ГРАНТООТРИМУВАЧ**

Фізико - механічний інститут імені Г.В. Карпенка

Організаційно-правова форма підприємства / установи / організації:

Державна організація (установа, заклад)

Підпорядкованість підприємства / установи / організації

Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ 03534506

Код КВЕД: 72.19

Основні/стратегічні напрями наукової діяльності

Фізичні основи та інформаційні технології технічної діагностики та дистанційного зондування

Фізико-хімічна механіка руйнування і міцності матеріалів: проблеми водневого впливу та корозії

Прізвище, ім'я, по батькові керівника підприємства/установи/

Назарчук Зіновій Теодорович

Юридична адреса підприємства/установи/організації:

79060, Львівська обл., місто Львів, Франківський район, вулиця Наукова, будинок 5

Поштова адреса

79060, Львівська обл., місто Львів, Франківський район, вулиця Наукова, будинок 5

Фактичн адреса підприємства/установи/організації:

79060, Львівська обл., місто Львів, Франківський район, вулиця Наукова, будинок 5

Контактні дані:

телефон організації +38(032)263-70-49

адреса електронної пошти: [pminasu@ipm.lviv.ua](mailto:pminasu@ipm.lviv.ua)

посилання на веб-сторінку: <http://www.ipm.lviv.ua>

#### **СУБВИКОНАВЕЦЬ**

Львівський національний університет імені Івана Франка

Організаційно-правова форма підприємства/установи/організації:

Державна організація (установа, заклад, підприємство).

Підпорядкованість підприємства/установи/організації:

Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ

02070987

Код(и) КВЕД

85.42

Стратегічні напрями наукової діяльності:

- 1) Математичні науки та природничі науки.
- 2) Технічні науки.
- 3) Біологія та охорона здоров'я.
- 4) Суспільні науки.
- 5) Гуманітарні науки та мистецтво.

ПІБ керівника підприємства/установи/організації:

Мельник Володимир Петрович.

Юридична адреса підприємства/установи/організації:

79000, Львівська обл., місто Львів, Галицький район, вул. Університетська, будинок 1.

Поштова адреса

79000, Львівська обл., місто Львів, Галицький район, вул. Університетська, будинок 1.

Фактична адреса

79000, Львівська обл., місто Львів, Галицький район, вул. Університетська, будинок 1.

Контактні дані:

Телефон: 0322-39-41-22

Адреса електронної пошти: [lnu@lnu.edu.ua](mailto:lnu@lnu.edu.ua).

Посилання на веб сторінку організації: <http://lnu.edu.ua/>

#### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

##### **4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)**

Розвиток методології вивчення фотопружності та створення бази даних перспективних акустооптичних матеріалів; прогнозування фотопружних властивостей на основі квантово-механічного розрахунку.

##### **4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)**

Для вибраних кристалів групи лангаситу (LGS), синтезованих кристалів групи  $A_2BX_4$  та халькогалогенідних структур експериментально дослідити фотопружні характеристики, анізотропію фотопружності та встановити вплив на них іонних заміщень та домішок. Провести квантово-механічний розрахунок (прогноз) фотопружності. Визначити найефективніші геометрії фотопружної взаємодії для акустооптичних застосувань.

##### **4.3. Детальний зміст Проєкту:**

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Відомі кристали для акустооптичних (АО) комірок мають недоліки: загасання акустичних хвиль, малі коефіцієнти АО якості та температурну нестабільність. На їх основі неможливо створити АО модулятори з високими експлуатаційними характеристиками: малими споживаними потужностями, високою температурною стабільністю і високою променевою стійкістю, широким спектральним діапазоном. Пошук нових матеріалів є актуальною задачею.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Колектив є лідером щодо вивчення фотопружності кристалів. Тому наукова новизна проєкту полягає: у застосуванні пріоритетних експериментальних методів до нових матеріалів, 2) у достовірних результатах визначення фотопружних коефіцієнтів і їх верифікації методом квантово-механічних розрахунків, 3) у вивченні просторової анізотропії фотопружності та пошуку ефективних геометрій фотопружної та АО взаємодії.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Інтерферометричний та поляризаційно-оптичний методи дослідження фотопружних констант, методи та програми аналізу просторової анізотропії фотопружності, методи синтезу матеріалів та їх дослідження на дифракційних спектрографах, дилатометрі, мас-спектрометрі, еліпсометрі, установці для ДТА; методи X-променевої, фотоелектронної і електронної спектроскопії, програми розрахунку зонно-енергетичної структури.

## 5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

### 5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик):

У 2021 р. проведено експериментальні та розрахункові (на основі теорії функціонала густини) дослідження п'єзо- та пружнооптичних ефектів (ПОЕ та ПрОЕ) запланованих до вивчення кристалів групи лангаситу (LGS) та групи  $A_2BX_4$ . *А саме:*

На прикладі модельних кристалів танталату літію  $LiTaO_3$  продемонстрована ефективність інтерферометричної методики достовірного вивчення ПОЕ на основі використання максимально можливої кількості геометрій експерименту і збіжності результатів, отриманих для незалежних умов експерименту. Важливим також є визначення сум п'єзооптичних коефіцієнтів (ПОК)  $\pi_{im}$  і їх порівняння з такимиж сумами незалежних ПОК, визначеними на зразку прямих зрізів.

Для кристалів галогерманату кальцію  $Ca_3Ga_2Ge_4O_{14}$  (CGG) отримано такі основні результати: 1) для усіх можливих геометрій експерименту інтерферометричним методом визначено керуючі напруження і на їх основі розраховано усі компоненти матриці ПОК, доведена достовірність значень цих компонент; 2) достовірність результатів визначення ПОК підтверджена також на основі поляризаційно-оптичних вимірювань; 3) порівнюючи значення ПОК в кристалах галогерманату кальцію  $Ca_3Ga_2Ge_4O_{14}$ , лангаситу  $La_3Ga_5SiO_{14}$  та катангаситу  $Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$ , можна стверджувати, що величини абсолютного ПОЕ та ПрОЕ за різницею ходу в цих кристалах є сумірними, проте кристали, що вирощені пізніше (лангасит та катангасит), володіють кращими фотопружними властивостями; 4) на основі матриць ПОК розраховано усі компоненти  $p_{in}$  матриць пружнооптичних коефіцієнтів (ПрОК).

Інтерферометричним методом визначено всі компоненти  $\pi_{im}$  матриці ПОК кристалів фторберилату амонію  $(NH_4)_2BeF_4$ . На основі матриці  $\pi_{im}$  розраховано всі компоненти  $p_{in}$  матриці ПрОК. За найбільшими коефіцієнтами  $\pi_{im}$  та  $p_{in}$  кристали  $(NH_4)_2BeF_4$  слід віднести до кращих фотопружних кристалічних матеріалів. Розраховано коефіцієнт акустооптичної (АО) якості  $M_2 = 10.5 \cdot 10^{-15} \text{ c}^3/\text{кг}$ , який відповідає пружнооптичному коефіцієнту  $p_{23} = 0,37$ . Це значення  $M_2$  на порядок переважає АО ефективність відомих матеріалів (кварц та борат стронцію), придатних для акустооптичної модуляції в ультрафіолетового випромінювання. Експериментально визначено піхвильові напруження та відповідні ПОК різниці ходу для кристалів  $(NH_4)_2BeF_4$ . Розраховані ПОК для кристалів  $(NH_4)_2BeF_4$  суттєво перевищують значення ПОК різниці ходу відомих матеріалів.

Показано, що на основі ефекту дифракційної фотопружності (чи електрооптики) можна досягати зміни оптичного шляху на величину, більше як на  $10\lambda$  ( $\lambda = 632.8 \text{ нм}$  – довжина світлової хвилі), що дозволить на порядок зменшити керуючі механічні чи електричні напруження.

Основні результати, щодо характеристики кристалів  $(NH_4)_2BeF_4$ : 1) досліджено температурну і спектральну залежність головних показників заломлення та двозаломлення. Встановлено, що в ділянці спектру (300...800 нм) та за температур (77...320 К) дисперсія  $n_i(l)$  добре описується двоосциляторною формулою Зельмейера; 2) встановлено, що двозаломлення досліджених кристалів чутливе до дії одновісних тисків уздовж головних кристалофізичних напрямків; 3) вивчено спектральні і температурні ( $T$ ) зміни ПОК різниці ходу та встановлено, що характер їх  $T$ -аномалій під час фазових переходів відповідає характеру аномальних змін показників заломлення.

На основі встановлених компонент тензорів п'єзо- та пружнооптичних коефіцієнтів (ПОК  $\pi_{im}$  та ПрОК  $p_{in}$ ) побудовано вказівні поверхні п'єзооптичного (ПОЕ) та пружнооптичного (ПрОЕ) ефектів в кристалах групи лангаситу ( $La_3Ga_5SiO_{14}$ ,  $Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$ ,  $Ca_3Ga_2Ge_4O_{14}$ ). Вивчено анізотропію ПОЕ та ПрОЕ в цих кристалах. Встановлено максимальні значення ефектів фотопружності та на їх основі проведена оцінка коефіцієнта АО якості  $M_2$  для досліджених кристалів. Побудовано та проведено аналіз екстремальних поверхонь коефіцієнта  $M_2$  для кристалів групи лангаситу LGS і CTGS. Максимуми цих поверхонь більш як на порядок переважають  $M_2$  кристалів кварцу, які активно використовують в АО пристроях УФ спектрального діапазону. Встановлено геометрії ефективних зрізів АО комірок з цих кристалів. Квантово-механічним методом розраховано ПрОК кристалів групи лангаситу:  $Ca_3TaGa_3Si_2O_{14}$  і  $Ca_3Ga_2Ge_4O_{14}$  (зроблено порівняння результатів розрахунків з експериментальними даними) та канангаситу  $Ca_3NbGa_3Si_2O_{14}$ ; отже, зроблено перший теоретичний прогноз величини ПрОЕ в цих кристалах.

Проведено спектральні й температурні дослідження рефрактивних даних кристалів  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  (група  $\text{A}_2\text{BX}_4$ ), в т.ч. під дією одновісного тиску вздовж головних кристалофізичних осей. Встановлено кристалічну структуру цього матеріалу та проведено його характеризацію на основі експериментів та квантово-механічних розрахунків, досліджено спектральні і температурні залежності ПОК різниці ходу. Встановлено абсолютні п'єзо- та пружнооптичні коефіцієнти домішкового ( $\text{Cu}^{2+}$ ) кристалу сульфату калію  $\text{K}_2\text{SO}_4$ ; останні є великими і мають значення від 0.2 до 0.3. Оцінено АО ефективність цього кристалу. Максимальне значення коефіцієнта АО якості є високим ( $M_2 = 4.8 \times 10^{-15} \text{ с}^3/\text{кг}$ ), що робить ці кристали, враховуючи їх прозорість до 170 нм, перспективними для АО модуляції світла УФ діапазону.

У 2021 р. опубліковано 5 статей в журналах *Optical Materials* (Q2), *Crystals* (Q2), *J. Opt. Soc. America B* (Q2), *J. Appl. Spectrosc.* (Q4), Журнал фіз. дослідж. (укр.), 2 статті в матеріалах міжнар. конфер. (Scopus), розділ в англomовній книзі (17 стор.) та тези 5-х доповідей на міжнар. форумах.

## 5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Відомі фотопружні матеріали мають недоліки, до яких відносяться велике затухання акустичних хвиль для  $\text{TeO}_2$  і  $\text{PbMO}_4$  на частотах  $f > 0,3$  ГГц, відносно малі коефіцієнти АО якості  $M_2 = (2-7) \cdot 10^{-15} \text{ сек}^3/\text{кг}$  для кристалів кварцу,  $\text{LiNbO}_3$ ,  $\text{LiTaO}_3$ , великі температурні ( $T$ ) коефіцієнти швидкостей звуку і показників заломлення для  $\text{PbMO}_4$ ,  $\text{LiNbO}_3$  і  $\text{LiTaO}_3$ , що є причиною  $T$ -нестабільності АО та фотопружних комірок. Крім того, вказані кристали мають малу оптичну променеву стійкість  $\sim 0,1$  ГВт/см<sup>2</sup> і високу короткохвильову межу області прозорості ( $\sim 0.4-0.5$  мкм). Заплановані в проєкті результати дозволять створити фотопружні та АО комірки, які за основними характеристиками, такими як: 1) малі споживані потужності  $\sim 0,1$  Вт, 2) висока  $T$ -стабільність без використання засобів  $T$ -стабілізації, 3) висока променева стійкість  $\sim 30$  ГВт/см<sup>2</sup> – для модуляції оптичних променів великої потужності, 4) високі робочі частоти модуляторів  $\sim (1-5)$  ГГц, 5) широкий спектральний діапазон – суттєво переважають світові аналоги.

Досліджені у 2021 р. кристали (див. п. 5.1) мають такі переваги: 1) група LGS має УФ межу прозорості  $\sim 250$  нм, відмінну оптичну якість, високу механічну міцність, високу  $T$ -стабільність, високі коефіцієнти електромеханічного зв'язку, низьке загасання акустичних хвиль, в  $\sim 3$  рази вищий від кварцу коефіцієнт  $M_2$ ; отже, ці кристали є конкурентами для матеріалів (кварц, борат стронцію), придатних для використання в УФ області спектру; 2) до переваг кристалів  $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$  та  $\text{LiNH}_4\text{SO}_4$  відносяться великі коефіцієнти  $M_2$  та прозорість у глибокій УФ області ( $\sim 170$  нм).

## 5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Проєкт відноситься до фундаментальних науково-дослідних робіт.

## 5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці

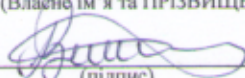
Методи вирощування великих якісних кристалів групи  $\text{A}_2\text{BX}_4$  та пріоритетні методи дослідження фотопружності кристалів цієї групи та групи LGS уже відсьогодні використовуються під час виконання бакалаврських, магістерських та PhD робіт. Крім того, підготовлена та подана до друку колективна монографія «Просторова анізотропія індукованих оптичних ефектів у кристалічних матеріалах», 2-й том, в якій ретельно відображені відповідні питання.

Примітка: Анотований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування

### Науковий керівник Проєкту

провідний науковий співробітник  
(посада)

Богдан Мицик  
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

  
(підпис)