

НАУКОВИЙ ВІСНИК

Ужгородського університету

ISSN 2414-0260

серія

ХІМІЯ

випуск №1 (49)

2023

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»**

**НАУКОВИЙ ВІСНИК
УЖГОРОДСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ
СЕРІЯ «ХІМІЯ»**

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

ISSN 2414-0260

**Засновник і видавець: Державний вищий навчальний
заклад «Ужгородський національний університет»**

Виходить 2 рази на рік

Заснований у жовтні 1996 року

Випуск № 1 (49) 2023

Ужгород – 2023

УДК 54
Н 34



**Науковий вісник Ужгородського університету.
Серія «Хімія». 2023, Випуск № 1 (49)**

Збірник наукових праць друкує статті, які містять теоретичні та практичні результати в галузі хімічних наук, охорони навколишнього природного середовища, а також методики викладання хімії та екології у вищій школі. Публікуються також огляди сучасного стану важливіших наукових проблем у галузі хімії та екології, огляди наукових конференцій, які відбулися в ДВНЗ «УжНУ», а також матеріали присвячені ювілеям.

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:

Головний редактор: Барчій І.Є., д.х.н. (Україна)
Заступник головного редактора: Сухарев С.М., д.х.н. (Україна)
Члени редколегії: Базель Я.Р., д.х.н. (Словаччина); Ворохта М., PhD (Чехія); Драбович Й., д.н. (Польща); Іщенко О.В., д.х.н. (Україна); Лендсел В.Г., д.х.н. (Україна); Марійчук Р.Т., PhD (Словаччина); Мілюкін М.В., д.х.н. (Україна); Онисько М.Ю., д.х.н. (Україна); Онисько П.П., д.х.н. (Україна); П'ясецькі М., д.н. (Польща); Переш Є.Ю., д.х.н. (Україна); Пехньо В.І., д.х.н., академік НАН України (Україна); Сідей В.І., к.х.н. (Україна); Сливка М.В., д.х.н. (Україна); Студеняк Я.І., к.х.н. (Україна); Тананайко О.Ю., д.х.н. (Україна); Федорчук А.О., д.х.н. (Україна)
Технічний помічник редактора: Стерчо І.П., к.х.н. (Україна)

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 21056-10856Р від 07.11.2014 року (раніше КВ №7972 від 09.10.2003 року).

Збірник наукових праць «Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Хімія» внесений у Список наукових видань, у яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт (Наказ МОН України № 1643 від 28.12.2019 р. (категорія Б, спеціальність 102 Хімія); Наказ МОН України № 261 від 06.03.2015 р.; Постанова Президії ВАК України № 1-05/4 від 14.10.2009 р.). Всі статті підлягають незалежному рецензуванню.

Видання індексується наукометричними базами даних: Camical Abstracts Service (CAS), WordCat, Crossref, BASE, Google Scholar.

*Рекомендовано до друку Вченою радою Державного вищого навчального закладу «Ужгородський національний університет» (Протокол № 7 від 20.06.2023 року)
та редакційно-видавничою радою університету (Протокол № 4 від 16.06.2023 року).*

Адреса засновника та видавця: ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 88000, м. Ужгород, вул. Підгірна, 46. тел. (03122)33341, факс: (03122)34202; e-mail: official@uzhnu.edu.ua
Веб-сайт видання: www.visnyk-khim.uzhnu.edu.ua

Адреса редакції:
88000, м. Ужгород, вул. О. Фединця, 53/1
тел./факс (+380312)631097; e-mail: visnyk-khim@uzhnu.edu.ua

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 2023

**MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCES
OF UKRAINE
STATE UNIVERSITY
«UZHHOROD NATIONAL UNIVERSITY»**

**SCIENTIFIC BULLETIN OF THE
UZHHOROD UNIVERSITY.**

**Series «Chemistry»
(Sci. Bull. Uzhh. Univ. Ser. Chem.)**

***NAUKOVIJ VÌSNIK UŽGORODS'KOGO
UNÌVERSITETU. Serìâ «Himiâ»***

COLLECTION OF THE SCIENTIFIC WORKS

ISSN 2414-0260

**Founder and publisher: State University
«Uzhhorod National University»**

Periodicity of 2 times per year

Founded in October, 1996

Issue № 1 (49) 2023

Uzhhorod – 2023

Scientific Bulletin of the Uzhhorod University.
Series «Chemistry». 2023, Issue № 1 (49)

Naukovij visnik Užgorods'kogo unìversitetu.
Seriâ Himiâ. 2023, Issue № 1 (49)

The collection of scientific works publishes articles that contain theoretical and practical results in the field of chemical sciences and environmental protection. Topics: inorganic chemistry, material science, analytical chemistry, organic chemistry; physical and colloidal chemistry, ecology, environmental safety.

EDITORIAL BOARD BY:

Editor-in-Chief:

Barchiy I., Dr. Sci., Ukraine

Deputies of Editor-in-Chief:

Sukharev S., Dr. Sci., Ukraine

Members:

Bazel Ya., Dr. Sci., Slovak Republic; **Drabowicz J.**, Dr. hab., Poland; **Fedorchuk A.**, Dr. Sci., Ukraine; **Ischenko O.**, Dr. Sci., Ukraine; **Lendel V.**, Dr. Sci., Ukraine; **Mariychuk R.**, PhD, Slovak Republic; **Milyukin M.**, Dr. Sci., Ukraine; **Onysko M.**, Dr. Sci., Ukraine; **Onysko P.**, Dr. Sci., Ukraine; **Pekhnyo V.**, Dr. Sci., Academic of Ukrainian National Academy of Sciences, Ukraine; **Peresh E.**, Dr. Sci., Ukraine; **Piasecki M.**, Dr. hab., Poland; **Sidey V.**, PhD, Ukraine; **Slivka M.**, Dr. Sci., Ukraine; **Studeniyak Ya.**, PhD, Ukraine; **Tananaiko O.**, Dr. Sci., Ukraine; **Vorokhta M.**, PhD, Czech Republic

Technical Assistant Editors

Stercho I., PhD, Ukraine

Certificate of state registration number KV 21056-10856R from 07.11.2014 (before KV 7972 from 09.10.2003).

Papers published in **Scientific Bulletin of the Uzhhorod University. Series «Chemistry»** are considered as publications suitable for Doctoral and PhD thesis (Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine from 28.12.2019, № 1643 (Category B); Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine from 06.03.2015, № 261; Decree of the Presidium of HAC of Ukraine from 14.10.2009, № 1.05/4). All manuscripts are subject to independent reviewed.

Indexing: Camical Abstracts Service (CAS), WordCat, Crossref, BASE, Google Scholar.

Recommended for printing of Academic Council State University «Uzhhorod National University» (protocol No. 7 from 20.06.2023) and Editorial and Publishing Council State University «Uzhhorod National University» (protocol No. 4 from 16.06.2023).

Address of founder and publisher: State University «Uzhhorod National University», Pidhirna str. 46, Uzhhorod, 88000, Ukraine. Tel.: (03122)33341, fax: (03122)34202; e-mail: official@uzhnu.edu.ua
Website edition: www.visnyk-khim.uzhnu.edu.ua

Address of release editing's:

Fedencja str. 53/1, Uzhhorod, 88000, Ukraine
tel./fax (+380312)631097; e-mail: visnyk-khim@uzhnu.edu.ua

ЗМІСТ (CONTENTS)

2023, Випуск № 1 (49)	1023, Issue № 1 (49)	Стор.
Філеп М.Й., Погодін А.І., Малаховська Т.О., Кохан О.П., Кайла М.І., Скубеніч К.В., Росоха І.В. ЕЛЕКТРИЧНА ПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІЧНОГО Ag_7PS_6 <i>Filep M.J., Pogodin A.I., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Kayla M.I., Skubenych K.V., Rosokha I.V.</i> <i>ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF SINGLE CRYSTALLINE Ag_7PS_6</i>		5-9
Філеп М.Й., Погодін А.І., Малаховська Т.О., Кохан О.П., Чундак С.Ю., Кайла М.І., Скубеніч К.В. ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛІЧНОГО Ag_8GeS_6 <i>Filep M.J., Pogodin A.I., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Chundak S.Yu., Kayla M.I., Skubenych K.V.</i> <i>ELECTRICAL PROPERTIES INVESTIGATION OF Ag_8GeS_6 SINGLE CRYSTAL</i>		10-14
Сабов В.І., Барчий І.Є., П'ясецькі М., Філеп М.Й., Погодін А.І., Сабов М.Ю. КВАЗІБІНАРНА СИСТЕМА $Ag_7PSe_6-Ag_2Se$ <i>Sabov V.I., Barchiy I.Ye. M.B., Piasecki M., Filep M.J., Pogodin A.I., Sabov M.Yu.</i> <i>QUASIBINARY SYSTEM $Ag_7PSe_6-Ag_2Se$</i>		15-19
Чорба О.Й., Сабов М.Ю., Філеп М.Й., Погодін А.І., Малаховська Т.О. ФАЗОВІ РІВНОВАГИ НА ПЕРЕРІЗІ $Cu_2Se - Cu_3SbSe_4$ <i>Chorba O.J., Sabov M.Yu., Filep M.J., Pogodin A.I., Malakhovska T.O.</i> <i>PHASE EQUILIBRIA IN THE SECTION $Cu_2Se - Cu_3SbSe_4$</i>		20-24
Шендер І.О., Погодін А.І., Філеп М.Й., Малаховська Т.О., Поп М.М., Кохан О.П., Сусліков Л.М. ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ Ag_7SiS_5I ТА Ag_7GeS_5I <i>Shender I.O., Pogodin A.I., Filep M.J., Malakhovska T.O., Pop M.M., Kokhan O.P., Suslikov L.M.</i> <i>OPTICAL PROPERTIES OF Ag_7SiS_5I AND Ag_7GeS_5I SINGLE CRYSTALS</i>		25-29
Фершал М.В. Студеняк Я.І. ПОТЕНЦІОМЕТРІЯ ПРИ ВСТАНОВЛЕННІ УМОВ УТВОРЕННЯ ТЕТРАФТОРБОРАТУ ЯК АНАЛІТИЧНОЇ ФОРМИ БОРУ <i>Fershal M., Studenyak Ya.</i> <i>POTENTIOMETRY IN DETERMINING THE CONDITIONS FOR THE FORMATION OF TETRAFLUORBORATE AS AN ANALYTICAL FORM OF BORON</i>		30-38
Галега О.В., Повідайчик М.В., Комаровська-Порохнявець О.З., Онисько М.Ю., Сухарев С.М. СИНТЕЗ ТА АНТИМІКРОБНА АКТИВНІСТЬ СЕЛЕНО(МЕРКУРІЙ)ГАЛОГЕНОВМІСНИХ ПОХІДНИХ БЕНЗОТІАЗОЛУ <i>Haleha O.V., Povidaichyk M.V., Komarovska-Porokhnyavets O.Z., Onysko M.Yu., Sukharev S.M.</i> <i>SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF SELENO(MERCURY)HALOGEN-CONTAINING BENZOTHAZOLE DERIVATIVES</i>		39-44
Король Н.І., Кут М.М., Лендел В.Г., Сливка М.В., Онисько М.Ю., Кривов'яз А.О., Русин І.Ф., Фаринюк Ю.І. ВПЛИВ МЕТОДІВ ОЦІНЮВАННЯ НА ПРОМІЖНІ РЕЗУЛЬТАТИ СТУДЕНТІВ-МЕДИКІВ <i>Korol N., Kut M., Lendel V., Slivka M., Onysko M., Kryvovjaz A., Rusyn I., Faryniuk Yu.</i> <i>INFLUENCE OF ASSESSMENT METHODS ON INTERMEDIATE RESULTS OF MEDICAL STUDENTS</i>		45-49
Кут М.М., Король Н.І., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. IN SILICO ДОСЛІДЖЕННЯ ПРИМІДИНАРИЛТЕЛУРИДІВ, ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ ІНГІБІТОРІВ $PLASMIDIUM FALCIPARUM$ <i>Kut M., Korol N., Onysko M., Lendel V.</i> <i>IN SILICO STUDY OF PYRIMIDINARYLTELURIDES AS POTENTIAL INHIBITORS OF $PLASMIDIUM FALCIPARUM$</i>		50-56
Кут М.М., Кут Д.Ж., Кривов'яз А.О., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. КОМПЛЕКСИ n-МЕТОКСИФЕНІЛТЕЛУРТРИХЛОРИДУ З АЛІЛЬНИМИ ТІОЕТЕРАМИ 5-АРИЛ-1,3,4-ОКСАДІАЗОЛУ <i>Kut M., Kut D., Krivovjaz A., Onysko M., Lendel V.</i> <i>COMPLEXES OF p-METHOXYPHENYLTELLURIUM TRICHLORIDE WITH ALLYL THIOETHERS OF 5-ARYL-1,3,4-OXADIAZOLE</i>		57-61
Глух О.С., Симканич О.І., Качаєв В.М., Глюдзик Е.І. ЗМІНА NDVI-ІНДЕКСУ КАРПАТСЬКОГО РЕГІОНУ УКРАЇНИ ПРОТЯГОМ 2000-2022 РОКІВ <i>Glukh O.S., Symkanych O.I., Kachaiev V.M., Hliudzyk E.I.</i> <i>THE NDVI INDEX CHANGE OF THE CARPATHIAN REGION OF UKRAINE DURING 2000-2022</i>		62-67
Русин В.М. МОЖЛИВІСТЬ ЕФЕКТИВНОГО ВИКОРИСТАННЯ ОСНОВНИХ БАРВНИКІВ ТОРГОВОЇ МАРКИ «БАЗАКРИЛ» ПРИ ВИЗНАЧЕННІ АНІОННИХ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН <i>Rusyn V.M.</i> <i>THE POSSIBILITY OF EFFECTIVE USE OF BASIC DYES OF THE "BAZAKRYL" TRADEMARK IN THE DETERMINATION OF ANIONIC SURFACTANTS</i>		68-75
ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРІВ ЗМІСТ		76-79 80

УДК 535.3+548.5:[546.57+546.28+661.693+546.22+546.15]

Шендер І.О., асп., Погодін А.І., к.х.н., с.н.с., Філеп М.Й., к.х.н., с.н.с., Малаховська Т.О., к.х.н., с.н.с., Поп М.М., к.фіз.-мат. н., докторант, Кохан О.П., к.х.н., доц., Сусліков Л.М., д.фіз.-мат. н., проф.

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ ТА $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$

ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,
88000, м. Ужгород, вул. Підгірна 46;
e-mail: mykhaylo.filep@uzhnu.edu.ua

Сполуки з розупорядкованою структурою привертають значний науковий інтерес, оскільки структурне розупорядкування впливає на властивості матеріалу. У даній роботі представлено дослідження оптичних властивостей монокристалічних $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$, що відносяться до сполук зі структурою аргіродиту. Монокристали $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ вирощені методом спрямованої кристалізації з розплаву. Дослідження монокристалів методом РФА вказує на те, обидві сполуки кристалізуються у ПГ F-43m. Дослідження оптичних властивостей проводили при кімнатній температурі (20°C) у спектральному діапазоні 200–1100 нм. Початок області оптичного пропускання спостерігається при $\lambda = 790$ нм та $\lambda = 860$ нм для $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ до $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ відповідно. Встановлено, що монокристали $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ володіють вищою пропускну здатністю у порівнянні з $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$. При переході від $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ до $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ спостерігається зміщення області пропускання у більш довгохвильову область. Енергії прямого дозволеного та забороненого оптичних переходів у монокристалах $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ встановлено з використанням рівняння Таука. Встановлено, що відповідні значення енергії є вищими у випадку монокристалу $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ для обох розглянутих оптичних переходів.

Ключові слова: аргіродити; монокристали; оптична спектроскопія; оптичні переходи.

Сполуки з розупорядкованою структурою привертають значний науковий інтерес, оскільки структурне розупорядкування безпосередньо впливає на транспортні властивості матеріалу. Структурне розупорядкування у кристалічних матеріалах зумовлене значною кількістю еквівалентних позицій, що володіють частковою заповнюваністю і як результат – формуванням розупорядкованої підсистеми, яка співіснує поряд з жорстким каркасом [1,2].

Велика кількість відносно рухливих іонів спричиняє прояв (наявність) так званої «liquid-like» поведінки, що відображає особливі властивості мобільних іонів [3]. «Liquid-like» поведінка забезпечує як високу рухливість іонів у межах розупорядкованої підрешітки, так і низьку теплопровідність матеріалів [3]. Дослідження оптичних властивостей монокристалів дозволяє встановити вплив кристалічної структурні на електрофізичні параметри досліджуваних матеріалів [4,5], оскільки структурне

розупорядкування спричиняє «розмиття» краю поглинання. Повідомляється про урбахівську поведінку краю оптичного поглинання у сполуках структури аргіродиту, що спричинена електрон-фононою взаємодією для кристалів одержаних як методом хімічних транспортних реакцій так і спрямованою кристалізацією з розплаву [6,7].

Сполуки $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ відносяться до суперіонних матеріалів, кристалізуються у кубічній сингонії, просторова група F-43m з параметрами 10.7116 Å та 10.6543 Å відповідно [8,9]. Обидві фази $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (1180 K) та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ (1176 K) плавляться конгруентно [9].

Метою даної роботи є дослідження оптичних властивостей монокристалів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$.

Експериментальна частина

Монокристали $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ вирощено методом спрямованої кристалізації

з розплаву у вакуумованих (0.13 Па) кварцових ампулах згідно методики описаної у [10]. Ріст монокристалів здійснювали з попередньо синтезованих полікристалічних сплавів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$. Одержано монокристали довжину ~ 40 мм та діаметром 12 мм.

Одержані монокристали ідентифікували методом РФА (РФА, ДРОН-4-07, $\text{CuK}\alpha$ -випромінювання, Ni -фільтр, $\Delta 2\theta = 0.02^\circ$, інтервал кутів $2\theta = 10-90^\circ$, експозиція 1 с). Спектри оптичного пропускання вимірювали за допомогою ґраткового монохроматора ЛОМО КСВУ-23.

Результати

За результатами досліджень методом РФА встановлено, що дифрактограми вирощених монокристалів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ не містить сторонніх домішок та добре узгоджується з відповідними дифрактограмою розрахованими за літературними [8] даними (Рис.1).

З одержаних монокристалів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ було виготовлено монокристалічні пластинки з товщиною ~ 0.02 см для подальших оптичних досліджень.

Дослідження оптичних властивостей проводили при кімнатній температурі (20°C) у спектральному діапазоні 200–1100 нм (Рис.2).

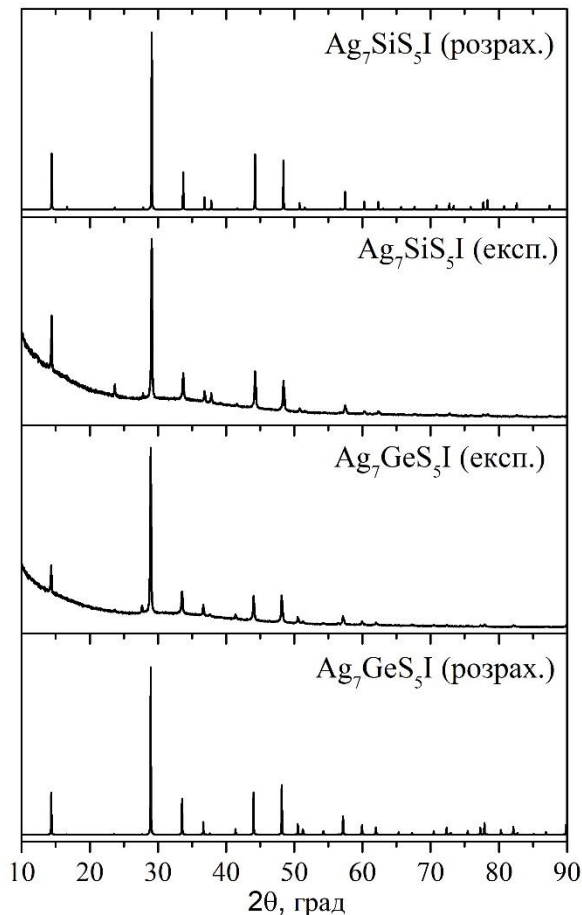


Рис. 1. Експериментальні та з розрахованими за літературними даними дифрактограми $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$.

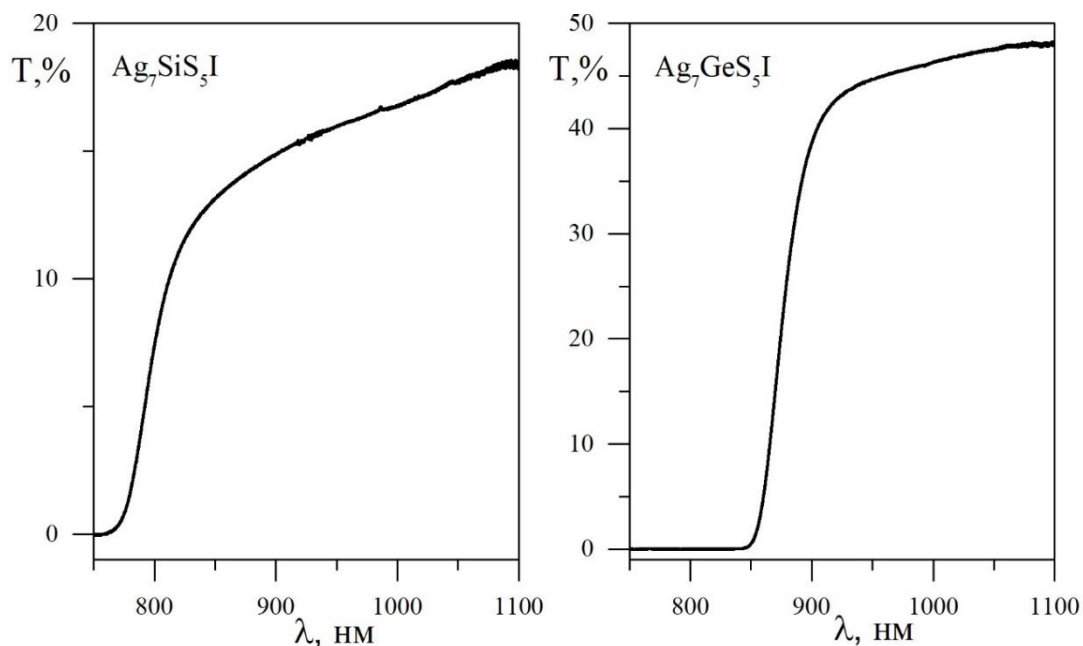


Рис. 2. Спектри пропускання монокристалів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ при 20°C .

У спектральному діапазоні 200 – 750 (850) нм монокристали $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ до $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ характеризуються областю сильного поглинання ($T \rightarrow 0\%$), тому дана область не представлена на Рис.2. Помітне оптичне пропускання ($T > 5\%$) спостерігається при $\lambda = 790$ нм та $\lambda = 860$ нм для $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ до $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ відповідно (Рис.2). За результатами

досліджень встановлено, що монокристали $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ володіють вищою пропускну здатністю у порівнянні з $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$. Варто зазначити, що при переході від $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ до $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ спостерігається зміщення області пропускання у більш довгохвильову область (Рис.2).

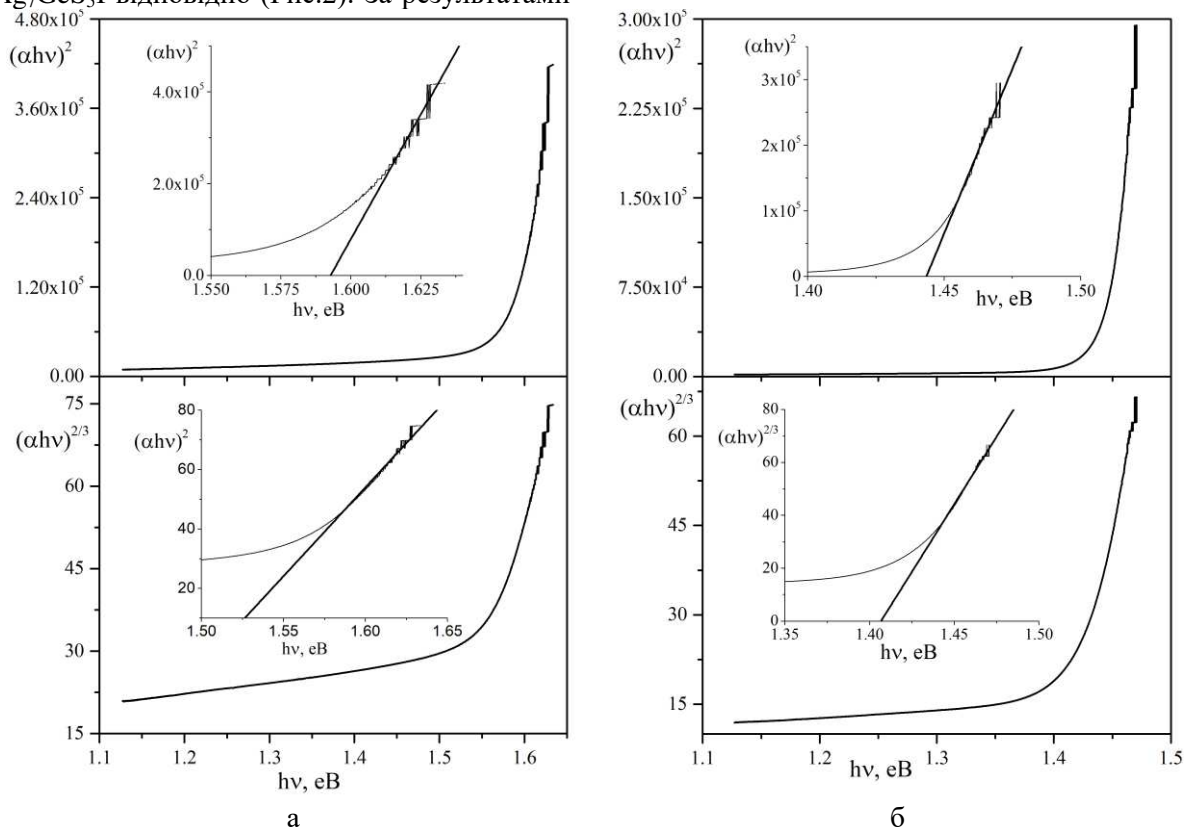


Рис. 3. Спектральні залежності $(\alpha hv)^{1/n}$ для монокристалів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ (а) та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ (б), на вставках зображено екстраполяцію прямолинійної частини відповідної кривої до нульового значення α .

Для встановлення енергії прямого дозволеного та забороненого оптичних переходів у монокристалах $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ використано рівняння Таука [11]:

$$(\alpha hv)^{1/n} = A(hv - E_g) \quad (1)$$

Рівняння Таука об'єднує коефіцієнт поглинання α з шириною забороненої зони E_g . До виразу також входить стала A , що є типовою для кожного матеріалу, стала Планка h та частота фотону ν . Параметр n у рівнянні (1) характеризує тип оптичного переходу і може приймати одне з чотирьох значення: $n = 1/2$ для прямого дозволеного переходу, $n = 3/2$ для прямого забороненого переходу, $n = 2$ для непрямого дозволеного переходу та $n = 3$ для непрямого забороненого переходу [11].

Коефіцієнт поглинання α визначали за формулою [11]:

$$\alpha = [\ln(1/T)]/d \quad (2),$$

де d – товщина зразка, а T – його пропускання.

Для встановлення відповідних значень E_g побудовано діаграми Таука у координатах $(\alpha hv)^{1/n} = f(hv)$ для значень $n = 1/2$ та $n = 3/2$ (Рис.3). Відповідні значення E_g встановлювали шляхом екстраполяції прямолинійної частини кривих до нульового значення коефіцієнта поглинання $\alpha=0$ (Рис.3). Відповідні значення наведені у Табл. 1.

Встановлено, що відповідні енергії є вищими у випадку монокристалу $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ для обох розглянутих оптичних переходів.

Таблиця 1. Енергії прямого дозволеного та забороненого переходів кристалів $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$

Сполука	E_g (при $n = 1/2$)	E_g (при $n = 3/2$)
$\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$	1.59 eV	1.53 eV
$\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$	1.44 eV	1.44 eV

Одержані результати вказують на те, що при заміні атомів Si на Ge у межах одного типу кристалічної структури (без зміни ПГ) приводить до зсуву енергій оптичних переходів у менш енергетичну область.

Висновки

Методом спрямованої кристалізації з розплаву вирошено монокристали $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$. Дослідження оптичних властивостей проводили при кімнатній температурі (20°C) у спектральному діапазоні 200–1100 нм. Встановлено, що монокристали $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ володіють вищою пропускну здатністю у порівнянні з $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$. Визначено значення енергій прямого дозволеного та забороненого оптичних переходів у монокристалах $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ з використанням рівняння Таука.

Дослідження здійснені в рамках науково-дослідних проєктів, що фінансуються в межах фонду державного бюджету ДР №0121U109484 та ДР №0121U107680.

Список використаних джерел

- Gao Y., Nolan A.M., Du P., and Wu Y., Yang C., Chen Q., Mo Y., Bo S.-H. Classical and Emerging Characterization Techniques for Investigation of Ion Transport Mechanisms in Crystalline Fast Ionic Conductors. *Chemical Reviews*. 2020, 120, 5954–6008. Doi: 10.1021/acs.chemrev.9b00747.
- Zhao K., Qiu P., Shi X., Chen L. Recent Advances in Liquid-Like Thermoelectric Materials. *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 1903867. Doi: 10.1002/adfm.201903867.

- Nolan A.M., Mo Y. A Solid with Liquid-like Diffusion: A Unique Superionic Conductor. *Chem.* 2019, 5, 2289–2290. Doi: 10.1016/j.chempr.2019.08.010.
- Olley J.A. Structural disorder and the Urbach edge. *Solid State Communications*. 1973, 13, 1437–1440. Doi: 10.1016/0038-1098(73)90184-1.
- Ledinsky M., Schönfeldová T., Holovský J., Aydin E., Hájková Z., Landová L., Neyková N., Fejfar A., De Wolf S. Temperature Dependence of the Urbach Energy in Lead Iodide Perovskites. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2019, 10(6), 1368–1373. Doi: 10.1021/acs.jpcclett.9b00138.
- Luchynets M.M., Studenyak V.I., Izai V.Yu., Minets Yu.V., Studenyak I.P., Kežionis A. Ferroelastic phase transition in $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}_{1-x}\text{Cl}_x$ mixed crystals. *Phase Transitions*. 2019, 92, 461–466. Doi: 10.1080/01411594.2018.1563788
- Studenyak I.P., Pop M.M., Shender I.O., Pogodin A.I., Kranjcec M. Temperature behaviour of fundamental absorption edge in superionic $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{I}$ crystals. *Ukr. J. Phys. Opt.* 2021, 22, 216–224. Doi: 10.3116/16091833/22/4/216/2021.
- Kuhs W.F., Nitsche R., Scheunemann K. The argyrodites – a new family of the tetrahedrally close-packed structures. *Mat. Res. Bull.* 1979, 14, 241–248. Doi: 10.1016/0025-5408(79)90125-9.
- Laqibi M., Cros B., Peytavin S., Ribes M. New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ (X = Si, Ge, Sn; Y = S, Se; Z = Cl, Br, I)-synthesis and electrical studies. *Solid State Ionics*. 1987, 23, 21–26. Doi: 10.1016/0167-2738(87)90077-4.
- Погодін А.І., Філеп М.Й., Кохан О.П., Малаховська Т.О., Шендер І.О., Студеняк І.П. Особливості вирощування монокристалів твердих розчинів в системах $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{I}$ – $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ – $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$. *Наук. вісник Ужгород. ун-ту. Сер. Хімія*. 2022, 1(45), 29–34. Doi: 10.24144/2414-0260.2021.1.29-34.
- Haryński Ł., Olejnik A., Grochowska K., Siuzdak K. A facile method for Tauc exponent and corresponding electronic transitions determination in semiconductors directly from UV–Vis spectroscopy data. *Optical Materials*. 2022, 127, 112205. Doi: 10.1016/j.optmat.2022.112205.

Стаття надійшла до редакції: 07.06.2023.

OPTICAL PROPERTIES OF $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ AND $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ SINGLE CRYSTALS**Shender I.O., Pogodin A.I., Filep M.J., Malakhovska T.O., Pop M.M., Kokhan O.P.,
Suslikov L.M.***Uzhhorod National University, Pidgirna St. 46, 88000, Uzhhorod; Ukraine,
e-mail: mykhaylo.filep@uzhnu.edu.ua*

Compounds with a disordered structure attract significant scientific interest, since structural disorder directly affects the properties of the material. This paper presents a study of the optical properties of $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ single crystal, which are related to compounds with the structure of argyrodite. Single crystals of quaternary $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ were grown by the method of directed crystallization from the melt. Investigation of grown single crystals by the XRD method indicates that both compounds crystallize in SG F-43m. The optical properties were studied at room temperature (20°C) in the spectral range of 200–1100 nm. The beginning of the optical transmission region is observed at $\lambda = 790$ nm and $\lambda = 860$ nm for $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ to $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$, respectively. It was established that $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ single crystals have a higher bandwidth compared to $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$. When transitioning from $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ to $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$, a shift of the transmission region to a longer wavelength region is observed. The energies of direct allowed and forbidden optical transitions in $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ and $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ single crystals were determined using the Tauc equation. It was established that the corresponding energies values are higher in the case of the $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ single crystal for both considered optical transitions.

Keywords: argyrodites; single crystals; optical spectroscopy; optical transitions.

References

1. Gao Y., Nolan A.M., Du P., and Wu Y., Yang C., Chen Q., Mo Y., Bo S.-H. Classical and Emerging Characterization Techniques for Investigation of Ion Transport Mechanisms in Crystalline Fast Ionic Conductors. *Chemical Reviews*. 2020, 120, 5954–6008. Doi: 10.1021/acs.chemrev.9b00747.
2. Zhao K., Qiu P., Shi X., Chen L. Recent Advances in Liquid-Like Thermoelectric Materials. *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 1903867. Doi: 10.1002/adfm.201903867.
3. Nolan A.M., Mo Y. A Solid with Liquid-like Diffusion: A Unique Superionic Conductor. *Chem.* 2019, 5, 2289–2290. Doi: 10.1016/j.chempr.2019.08.010.
4. Olley J.A. Structural disorder and the Urbach edge. *Solid State Communications*. 1973, 13, 1437–1440. Doi: 10.1016/0038-1098(73)90184-1.
5. Ledinsky M., Schönfeldová T., Holovský J., Aydin E., Hájková Z., Landová L., Neyková N., Fejfar A., De Wolf S. Temperature Dependence of the Urbach Energy in Lead Iodide Perovskites. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2019, 10(6), 1368–1373. Doi: 10.1021/acs.jpcclett.9b00138.
6. Luchynets M.M., Studenyak V.I., Izai V.Yu., Minets Yu.V., Studenyak I.P., Kežionis A. Ferroelastic phase transition in $\text{Cu}_6\text{PS}_5\text{Br}_{1-x}\text{Cl}_x$ mixed crystals. *Phase Transitions*. 2019, 92, 461–466. Doi: 10.1080/01411594.2018.1563788
7. Studenyak I.P., Pop M.M., Shender I.O., Pogodin A.I., Kranjcec M. Temperature behaviour of fundamental absorption edge in superionic $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{I}$ crystals. *Ukr. J. Phys. Opt.* 2021, 22, 216–224. Doi: 10.3116/16091833/22/4/216/2021.
8. Kuhs W.F., Nitsche R., Scheunemann K. The argyrodites – a new family of the tetrahedrally close-packed structures. *Mat. Res. Bull.* 1979, 14, 241–248. Doi: 10.1016/0025-5408(79)90125-9.
9. Laqibi M., Cros B., Peytavin S., Ribes M. New silver superionic conductors $\text{Ag}_7\text{XY}_5\text{Z}$ (X = Si, Ge, Sn; Y = S, Se; Z = Cl, Br, I)-synthesis and electrical studies. *Solid State Ionics*. 1987, 23, 21–26. Doi: 10.1016/0167-2738(87)90077-4.
10. Pogodin A.I., Filep M.I., Kokhan O.P., Malakhovska T.O., Shender I.O., Studeniak I.P. Osoblyvosti vyroshchuvannya monokystaliv tverdykh rozchyniv v systemakh $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{I}$ – $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ ta $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$ – $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$. *Nauk. visnyk Uzhhorod. un-tu. Ser. Khimiia*. 2022, 1(45), 29–34. Doi: 10.24144/2414-0260.2021.1.29-34 (in Ukr.).
11. Haryński Ł., Olejnik A., Grochowska K., Siuzdak K. A facile method for Tauc exponent and corresponding electronic transitions determination in semiconductors directly from UV–Vis spectroscopy data. *Optical Materials*. 2022, 127, 112205. Doi: 10.1016/j.optmat.2022.112205.