Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100618

Державний реєстраційний номер: 0120U104913

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Аналіз перспективних органічно-неорганічних мультифероїків та першопринципних методів дослідження їхніх магнітних властивостей та магнітоелектричної взаємодії. Вирощування кристалів мультифероїків, перовскітів і споріднених матеріалів. Розрахунок зонної енергетичної структури фероїків.

Початок етапу: 10.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, Київська обл., 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 890

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Багатофункціональні органічно-неорганічні магнітоелектричні, фотовольтаїчні і сцинтиляційні матеріали

Назва роботи англійською:

Multifunctional organic-inorganic magnetoelectric, photovoltaic and scintillation materials

Реферат українською:

Проведено аналіз перспективних мультифероїків з родини органічно-неорганічних кристалів з комплексами іонів перехідних металів Найперспективнішими з них з точки зору багатофункціональності можна вважати кристали [(CH3)3NH]MnC13×2H2O (TrMA-MnCl3), [N(C2H5)4]2CoClBr3 (TEA-CoClBr3) і (NH2(C2H5)2)2MeCl4 (DEA-MeCl4, Me = Cu, Co). Встановлено залежність фізичних властивостей фероїків, зокрема, їхніх структурних і пружних властивостей, а також ширини забороненої зони від вибір методу моделювання, зокрема, обмінно-кореляційного функціоналу у рамках теорії функціоналу густини. Проведена структурна оптимізація моделей досліджуваних фероїків та проаналізовано структурну стійкість оптимізованих структур за допомогою розрахунків пружних характеристик та вібраційних властивостей. Для всіх кристалічних структур розраховано зонно-енергетичні діаграми та парціальну густину станів. Вирощено кристали фероїків, а також отримано нано- і мікрокомпозити кристалів DEA-CuCl4 в різних полімерних матрицях, причому технологія отримання згаданих мікрокомпозитів розроблена вперше.

Реферат англійською:

The analysis of perspective multiferroics from the family of organic-inorganic crystals with complexes of transition metal ions was carried out. The most promising of them in terms of the multifunctionality were found to be the crystals of [(CH3)3NH]MnC13×2H2O (TrMA-MnCl3), [N(C2H5)4]2CoClBr3 (TEA-CoClBr3) and (NH2(C2H5)2)2MeCl Me = Cu, Co). The dependence of the physical properties of ferroics, in particular, their structural and elastic properties, as well as the bandgap on the preference of modeling method, in particular, the exchange-correlation functional within of the density functional theory was performed. The structural optimization of the investigated ferroics is carried out and the structural stability of the optimized structures is analyzed employing calculations of elastic characteristics and vibration properties. The band energy diagrams and partial density of states were calculated for all crystal structures. Ferroic crystals were grown, as well as nano- and microcomposites of DEA-CuCl4 crystals in various polymer matrices were obtained, and the technology for obtaining of these microcomposites was developed for the first time.

Індекс УДК: 621.311.243, 621.315.592, 621.315.61, 666.655; 621.315.612, 621.318.1, 666.265; 621.387.464

Коди тематичних рубрик: 44.37.31, 47.09.29, 47.09.31, 47.09.33, 47.09.35, 47.09.43

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Капустяник Володимир Богданович

Науковий ступінь: д.ф.-м.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Технологія створення мікрокомпозитів на основі кристалів DEA-CuCl4 у полімерній матриці

Назва НТП англійською: Technology of creating microcomposites based on DEA-CuCl4 crystals in a polymer matrix

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Виготовлення мікрокомпозитів полягало в диспергуванні мікрокристалів DEA-CuCl4 в рідкому полімері, в ролі якого використовували латекс і полістирен. Монокристали DEA-CuCl4 спочатку подрібнювали з допомогою млина до розміру мікрочастинок. Потім диспергували у рідкому полімері і відфільтровували з допомогою фільтра частинки певного розміру. Отриману суміш після фільтрування осаджували методом spin coating на скляні підкладки ВК7. Як засвідчують результати дослідження з використанням оптичного мікроскопа, розміри частинок були порядку 20 мкм у латексній матриці і 200 мкм – у полістиреновій. Отримані таким способом мікрокомпозити були напівпрозорими, доброї якості і стабільними незалежно від впливу навколишнього середовища

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Гірняк С. Природа діелектричної дисперсії у кристалах диетиламінтетрахлоркобальтів / С. Гірняк, С. Семак, В. Капустяник // Тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА-2020, жовтень 2020 р. – Львів, Україна. – С. А6.

Козаченко О. Зонно-енергетична структура і магнітні властивості фероїків (CnH2n+1NH3)2CuCl4 / О. Козаченко, О. Бовгира, М. Коваленко // Тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА-2020, жовтень 2020 р. – Львів, Україна.– С. С8.

Коломієць В. Зонно-енергетична структура та оптичні властивості кристалів перовскіту CsPbBr3 / В. Коломієць, В. Капустяник, М. Коваленко // Тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА-2020, жовтень 2020 р. – Львів, Україна.– С. С19.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мельник Володимир Петрович
д. філос. н.

Перелік осіб-виконавців

Бовгира Олег Вікторович
(к.ф.-м.н., 01.04.10)

Еліяшевський Юрій Ігорович
(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Коваленко Марія Василівна
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Козаченко Олег Володимирович

Мостовой Устим Романович

Рудко Микола Степанович

Семак Світлана Ігорівна
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Чорній Юрій Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Капустяник Володимир Богданович

Телефон

+38 (097) 482-99-91

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

