Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106682

Державний реєстраційний номер: 0120U104913

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Порівняльний аналіз експериментальних даних і результатів комп'ютерного моделювання щодо магнітних властивостей і магнітоелектричних взаємодій у фероїках і мультифероїках. Інтерпретація природи магнітного і сегнетоелектричного впорядкування та магнітоелектричних взаємодій у досліджуваних фероїках і мультифероїках.

Початок етапу: 09.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

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.): 564.799

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:

Експериментально вивчено магнітні, оптико-спектральні і сегнетоелектричні властивості, доменну структуру і магнітоелектричні взаємодії у найбільш перспективних для практичних застосувань фероїках. Вперше візуалізована доменна структура і пояснені особливості сегнетоеластоелектричного типу впорядкування у кристалах (CH3)2CHNH3]4Cd3Cl10. Запропоновано моделі для опису природи магнітного впорядкування і магнітних властивостей кристалів [(CH3)3NH]MnC13×2H2O і (N(C2H5)4)2CoCl2Br2. Виявлено сегнетоелектричну фазу і спонтанний магніто-електричний ефект і запропоновано модель сегнетоелектричного впорядкування в кристалах (N(C2H5)4)2CoCl2Br2. Отримані експериментальні дані щодо магнітних властивостей [(CH3)3NH]MnC13×2H2O і (N(C2H5)4)2CoCl2Br2 і сегнетоелектричних властивостей та магнітоелектричних взаємодій в останньому кристалі зокрема, підтверджені даними комп'ютерного моделювання із застосуванням моделі DFT. В кристалах NH2(CH3)2Ga0.935Cr0.065(SO4)2×6H2O виявлені дуже значний магнітодіелектричний ефект, а також істотний вплив магнітного поля на спонтанну поляризацію. Запропонована модель, яка пояснює магнітоелектричні взаємодії у цих кристалах. Розроблено спосіб отримання термохромного мікрокомпозита на основі кристалів NH2(C2H5)2)2CuCl4 для термографії.

Реферат англійською:

The magnetic, optical-spectral and ferroelectric properties as well as the domain structure and magnetoelectric interactions in the most prospective for practical applications ferroics were investigated. For the first time the domain structure in (CH3)2CHNH3]4Cd3Cl10 was visualized and the peculiarities of the ferroelastoelectric ordering were explained. The models describing the nature of the magnetic ordering and magnetic properties of [(CH3)3NH]MnC13×2H2O and (N(C2H5)4)2CoCl2Br2 were proposed. The ferroelectric phase and spontaneous magnetoelectric effect has been found in (N(C2H5)4)2CoCl2Br2 crystals and the model describing the ferroelectric ordering was proposed. The obtained experimental results concerning the magnetic properties of [(CH3)3NH]MnC13×2H2O and (N(C2H5)4)2CoCl2Br2 and the ferroelectric properties and magnetoelectric interactions in the latter crystal were confirmed by the data of computer modeling with employing of the DFT model. It has been shown that NH2(CH3)2Ga0.935Cr0.065(SO4)2×6H2O crystal is characterized by a very strong magnetodielectric effect as well as the considerable influence of magnetic field on the spontaneous polarization. The model describing the magnetoelectric interactions in this crystal was proposed. The method of manufacturing of the thermochromic microcomposite on the basis of NH2(C2H5)2)2CuCl4 for thermography was developed.

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: Спосіб отримання матеріалів з великим магнітоелектричним ефектом

Назва НТП англійською: Method of obtaining of materials with a large magnetoelectric effect

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології

Галузь застосування: комп'ютерна та сенсорна техніка

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На прикладі родини твердих розчинів – NH2(CH3)2Me1-xCrx(SO4)2·6H2O (DMAMe1-xCrxS, Me=Al, Ga) продемонстровано можливість отримання матеріалів зі значною магнітоелектричною взаємодією та можливістю модифікації величини та зміни знаку такої взаємодії шляхом варіації концентрації Cr3+. Показано, що кристали DMAGa0.935Cr0.065S в околі температури Кюрі володіють найбільшим магнітодіелектричним ефектом серед усіх відомих фероїків.

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

Kovalenko M. Structural, Electronic and Optical Properties of CsPbBr3 and CH3NH3PbBr3: First-Principles Modeling / M. Kovalenko, O. Bovgyra, V. Kolomiets, V. Kapustianyk, O. Kozachenko // Proceedings of 2021 IEEE 12th International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT), Lviv, Ukraine, 19-21 May, 2021.

– P. 232–237.

Kapustianyk V. Domain Structure and Peculiarities of Surface Morphology of (CH3)2CHNH3]4Cd3Cl10 Ferroelastoelectrics / V. Kapustianyk, Yu. Chornii, Z. Czapla, Yu. Eliyashevskyy, D. Podsiadła and R. Serkiz // Acta Physica Polonica A – 2021. – V.140, No 1. – P.58–63.

Коваленко М. Структура та електронні властивості перовскіту CsPbBr3: першопринципні розрахунки / М. Коваленко, О. Бовгира, В. Коломієць // Журнал фізичних досліджень. – 2021. – т. 25, № 4. – С. 4701 (9с.).

Бовгира О. Структурні, електронні та оптичні властивості мультифероїків групи (CnH2n+1NH3)2CuCl4 // О. Бовгира, М. Коваленко, В. Капустяник, О. Козаченко // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2021. – т. 58. – С. 16–29.

Kozachenko O. Electronic structure and optical properties of organic-inorganic CH3NH3PbBr3 perovskites // O. Kozachenko, M. Kovalenko, O. Bovgyra // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА–2021, Львів, 18-20 травня. – P. С6.

Kozachenko O. V. Band structure and magnetic properties of quasi-one-dimensional antiferromagnet (TrMA)MnCl3×2H2O / O.V. Kozachenko, O.V. Bovgyra, M.V. Kovalenko, V.B. Kapustianyk // Abstract book International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2021)”. 25–27 August 2021. – Lviv, Ukraine. – P. 434.

Рішення про державну реєстрацію корисної моделі від 29.11.2021 № 15143/ЗУ/21 щодо Заявки на корисну модель МПК (2021.01) G02F 1/00, G08L 33/00. Спосіб отримання композитного матеріалу з покращеними термохромними властивостями. Скальський В. Р., Семак П. М., Капустяник В. Б., Семак С. І., Чорній Ю. В., № u 202104493. Заявл. 03.08.2021 р. Заявник(и) ФМІ ім. Г.В. Карпенка НАН України, ЛНУ імені Івана Франка.

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

