Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0424U000028

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-02-2024

Статус: Підтверджена МОН

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Міністерства освіти і науки України про затвердження рішень атестаційної колегії Міністерства освіти і науки України від 24.04.2024 №582

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коваленко Ольга Анатоліївна
2. Olha A. Kovalenko

Кваліфікація: 02.00.04

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0003-2421-6917

Вид дисертації: кандидат наук

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 24-01-2024

Спеціальність за освітою: Хімічні технології тугоплавких неметалевих і силікатних матеріалів

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Омеляна Пріцака, буд. 3, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

III. Відомості про дисертацію

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.207.02

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Омеляна Пріцака, буд. 3, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Омеляна Пріцака, буд. 3, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Повне найменування юридичної особи: Інститут Йозефа Стефана

Код за ЄДРПОУ: 55560822

Місцезнаходження: Ямова дорога 39, Любляна, 1000, Словенія

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.01, 31.15.01, 31.17.15

Тема дисертації:

1. ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ІЗО- ТА АНІЗОТРОПНИХ НАНОСТРУКТУР ТИТАНАТУ БАРІЮ

2. PECULIARITIES OF THE FORMATION OF ISO- AND ANISOTROPIC BARIUM TITANATE NANOSTRUCTURES

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу нанорозмірних частинок на основі BaTiO3 різної структури та морфології, а також дослідженню факторів, що впливають на фізико-хімічні властивості матеріалу та визначають взаємозв'язок між хімічним складом, структурою, морфологією та властивостями даного матеріалу. Встановлено зв'язок між умовами осадження прекурсорів в методі Пекіні, складом осадженої проміжної сполуки, характером термічного розкладу та фізико-хімічними властивостями кінцевого BaTiO3. Показано оптимальні умови формування оксалатних комплексів з мінімальною кількістю гідроксильних груп, відмінність у механізмі їх термічного розкладу, а також їх переваги з точки зору формування однофазної сполуки BaTiO3, мінімізації температури термічного розкладу проміжного комплексу, а також розмірів частинок кінцевого BaTiO3. Показано залежність фазового складу та розмірів агрегатів від співвідношення Ba/Ti. Показано залежність розмірів кристалітів та частинок від умов осадження прекурсору та співвідношення Ba/Ti. Показано синергетичний вплив pH середовища та концентрації реагентів на формування агрегатів на основі гексагоноподібних двовимірних нанорозмірних полікристалів та припущено природу гексагональної форми даних агрегатів. Показано вплив параметрів гідротермального синтезу (природи вихідного прекурсору та розчинника, концентрації реагентів, pH середовища, температури та тривалості процесу) на розвиток ізо- та анізотропної структури кристалу на основі BaTiO3 та його проміжних сполук, а також їх морфологію. Показано вплив природи, полярності та концентрації молекул ПАР на селективність інгібування граней кристалу та характер його росту. Встановлено діапазон перенасичення для отримання монокристалічних наностержней BaTiO3 з c/a = 1.013 та співвідношенням сторін частинок 6–9. Припущено можливі причини формування одновимірних монокристалів BaTiO3. Встановлено лінійну залежність ширини та довжини частинок від ступеня перенасичення з від'ємним нахилом в діапазоні SR = 19 – 39. Виявлено зміну домінуючого механізму кристалізації з топотактичного перетворення in-situ на розчинення-осадження вище SR = 19. Було виявлено, що збереження морфології відбувається переважно через механізм in-situ і вимагає нижчої швидкості осадження частинок і напружень в кристалі. Показано розвиток морфології від пластинчастого проміжного прекурсору (SR = 6 – 9) до стержнеподібного продукту з співвідношенням сторін 6 – 9 (SR = 19 – 29) і до наночастинок з невизначеною формою та центрисиметричною структурою (SR = 39). 23 Показано можливість отримання мезокристалічних двовимірних наночастинок BaTiO3 з високою орієнтацією кристалів (дезорієнтація не більше 2 град) з розмірами зерен 22 нм за рахунок комбінування гідротермальних умов (200 C, 10 бар) для формування пластинчастих шаблонів на основі гліколяту металів та подальшої термічної обробки за звичайного тиску та температури 730 °C до повного перетворення проміжної сполуки в BaTiO3. Показано склад прекурсору та особливості його трансформації в мезокристал BaTiO3. Вперше виміряно електричні властивості безпосередньо нанорозмірних пластин на основі BaTiO3 та його проміжних сполук. Вперше виявлено резистивні властивості пластинчастих зразків прекурсору та BaTiO3, що вказує на потенційне використання даних зразків в якості шару резистивного перемикання в мемристорах. Ключові слова: наноструктури, BaTiO3, перовскіт, монокристал, полікристал, меха-нізм кристалізації, оксалатний комплекс, осадження, гідротермальний синтез, термічний розклад, морфологія, анізотропія, резистивні властивості.

2. The thesis work is devoted to the synthesis of nano-sized particles based on BaTiO3 of different structure and morphology, as well as to the study of factors that affect the physical and chemical properties of the material and determine the relationship between the chemical composition, structure, morphology, and properties of this material. The relationship between the precipitation conditions of precursors in the Pechini method, the composition of the precipitated intermediate compound, the nature of thermal decomposition, and the physicochemical properties of the final BaTiO3 were established. The optimal conditions for the formation of oxalate complexes with a minimum number of hydroxo groups, the difference in the mechanism of their thermal decomposition, as well as their advantages from the point of view of the formation of a single-phase compound

BaTiO3, minimization of the thermal decomposition temperature of the intermediate complex, as well as the particle sizes of the final BaTiO3 are shown. The dependences of the phase composition and aggregate sizes on the Ba/Ti ratio, are shown. The dependence of crystallite and particle sizes on precursor deposition conditions and Ba/Ti ratio is shown. The synergistic effect of pH and concentration of reagents on the formation of aggregates based on hexagonal two-dimensional nanosized polycrystals is shown, and the nature of the hexagonal shape of these aggregates is assumed. The influence of hydrothermal synthesis parameters (nature of the initial precursor and solvent, concentration of reagents, pH of the medium, temperature, and process duration) on the development of the iso- and anisotropic structure of the crystal based on BaTiO3, and its intermediate compounds, as well as their morphology, is shown. The influence of the nature, polarity, and concentration of surfactant molecules on the selectivity of inhibition of crystal faces, and the nature of its growth is shown. The supersaturation range for obtaining single crystalline BaTiO3 nanorods with c/a= 1.013 and particle aspect ratio of 6–9 was established. Possible reasons for the formation of a one-dimensional single crystalline BaTiO3 nanoparticle are assumed. A negative sloped linear dependence of the width and length of the particles on the degree of supersaturation was established in the range of SR = 19 – 39. A change in the dominant crystallization mechanism from in-situ topotactic transformation to dissolution-precipitation above 24 SR = 19 was revealed. It was found that the preservation of morphology occurs mainly through the in-situ mechanism and requires a lower rate of particle deposition and stresses in the crystal. The development of morphology from a lamellar intermediate precursor (SR = 6 – 9) to a rod-like product with an aspect ratio of 6–9 (SR = 19–29) and to nanoparticles with an undefined shape and a centrosymmetric structure (SR = 39) is shown. The possibility of obtaining mesocrystalline two-dimensional BaTiO3 nanoparticles with high orientation of crystallites (misorientation less than 2 degrees) with grain sizes of 22 nm is shown. This is done by combining hydrothermal conditions (200 °C, 10 bar) to form the plate-shaped templates based on metal glycolate and subsequent heat treatment at standard pressure and temperature of 730 °C until the intermediate compound is completely transformed into BaTiO3. The composition of the precursor and the features of its transformation into a BaTiO3 mesocrystal are shown. For the first time, the electrical properties of nanoscale plates based on BaTiO3 and its intermediate compounds were directly measured. For the first time, the resistive properties of plate-shaped samples of the precursor and BaTiO3 were revealed, which indicates the potential use of these samples as a resistive switching layer in the memristors. Keywords: nanostructures, BaTiO3, perovskite, single crystalline, polycrystal, crystallization mechanism, oxalate complex, deposition, hydrothermal synthesis, thermal decomposition, morphology, anisotropy, and resistive properties.

Державний реєстраційний номер ДіР: 05416930

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Kovalenko O. Formation of single-crystalline BaTiO3 nanorods from glycolate by tuning the supersaturation conditions / Kovalenko, O., Škapin, S. D., Kržmanc, M. M., Vengust, D., Spreitzer, M., Kutnjak, Z., & Ragulya, A..// Ceramics International,48(9). – 2022. – P. 11988- 11997. ISSN: 02728842. https://doi.org/10.10-16/j.ceramint.2022.01.048.
- O. Kovalenko. A review of the synthesis of single-crystal 1D perovskite nanostructures by the hydrothermal method / O. Kovalenko, and A. Ragulya// OAJ Materials and Devices 5.2. -2021. DOI:10.23647/ca.md202003071
- O. Kovalenko. "The influence of the precursor composition on the peculiarities of the barium titanate formation / O. Kovalenko // Ukrainian Chemistry Journal 88.8. – 2022. – P. 66-78.

https://doi.org/10.33609/2708-129X.88.08.2022.66-78

- Коваленко О.А. Вплив параметрів синтезу прекурсору BaTiO(C2O4)2 на співвідношення Ba/Ti для отримання стехіометричного BaTiO3 / Коваленко О.А., Рагуля А.В. // Современные проблемы физического материаловедения. – Київ, 2017. – 26. – С. 192 – 200
- Kovalenko, O. A. The Control of the Structure and Size of the Barium Titanate Nanoparticles Prepared by the Oxalate Method / Kovalenko, O. A., Shyrokov, O. V., Kolesnichenko, V. G., Ragulya, A. V. // Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii 21.2. - 2023. ISSN: 18165230. https://doi.org/10.15407/nnn.21.02.413
- Коваленко О.А. Дослідження впливу різних органічних кислот та середовищ на агрегативну стійкість наночастинок титанату барію / Коваленко О.А., Дуліна І.О., Рагуля А.В. // Ceramics: Science and Life. – 2016. – №. 2 (31). – С. 66-76. https://doi.org/10.26909/csl.2.2016.6
- Коваленко О. А. Особливості допування нанодисперсного порошку титанату барію з метою отримання сегнетоелектриків-релаксорів з розмитим фазовим переходом / Коваленко О. А., Рагуля А. В. // Керамика: наука и жизнь. -2017. - № 1. – С. 12-23. https://doi.org/10.26909/csl.1.2017.2
- Kovalenko, O. A. The effect of different organic acids on the aggregate stability of the BaTiO 3 nanoparticles / Kovalenko, O. A., I. O. Dulina, and A. V. Raguly // Proc. Int. Conf. Nanomater. Appl. Prop. — 2016 – P. 01PCSI06-1. ISBN: 978-150902513-8, https://doi.org/10.1109/NAP.2016.7757263.
- I.O. Dulina, O.A.Kovalenko. Micelle composition an sedimentation stability of BaTiO3nanopowder suspensions with different acidic surfactants. 2nd International research and practice conference. “Nanotechnology and nanomaterials”, Lviv, Ukraine (2014).
- О. Коваленко, І. Дуліна. Агрегативна стійкість суспензій на основі нанопорошків BaTiO3. Матеріали всеукраїнської науково-практичної конференції «Актуальні проблеми хімії та хімічної технології» Київ (2014)
- O.A. Kovalenko, A.V. Ragulya. Effect of Ba/Ti ratio in BaTiO3 on the crystal parameters and crystallites size. 6nd International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials”, Kyiv, Ukraine (2018)
- O.A. Kovalenko, O.V.Shyrokov, A.V. Ragulya. Dimensional effect in the production of BaTiO3 by thermal decomposition of barium titanyl oxalate. Workshop for young ceramists, Bologna (2018)
- O. Kovalenko, S. Skapin, M. Macek Krzmanc, D. Vengust, S. Umerova, S. Ivanchenko, D. Baranovsky, M. Spreitzer, A. Ragulya. Obtaining pure stoichiometric lead titanate predetermined morphology. Conference “Nanomaterials: Microstructure and Properties: TRAMP19”, Marrakech, Morocco (2019)
- O. Kovalenko, S. Škapin, M. MačekKržmanc, S. Tkachenko, LadislavČelko, D. Vengust, N. Daneu, A. Kocjan, H. Hudelja, M. Spreitzer, S. Umerova, S. Ivanchenko, D. Baranovsky, A. Ragulya. Impact of the barium tytanyl oxalate precipitation condition on the aggregate formation characteristics. The 18th Young Researchers' Conference Materials Science and Engineering, Belgrade, Serbia (2019)
- Kovalenko, O., Vengust, D., Kržmanc, M. M., Spreitzer, M., Škapin, S., & Ragulya, A. (2021). Influence of Supersaturation on the Obtaining of Single-crystalline BaTiO3 Nanorods via a Single-step Hydrothermal Technique. Conference Nanomaterials: Applications & Properties, Odesa, Ukraine (2021)
- Kovalenko, O. Obtaining of the rod-shaped BaTiO3 nanoparticle and its properties. YCN Workshop, Aveiro, Portugal (2023)

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 05416930

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рагуля Андрій Володимирович

2. Andrey V. Ragulya

Кваліфікація: д.т.н., професор, 05.16.06

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-0859-000

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Омеляна Пріцака, буд. 3, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сокольський Георгій Володимирович

2. Georgiy V. Sokolskyi

Кваліфікація: д. х. н., доц., 02.00.04

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0002-6665-2744

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Солопан Сергій Олександрович

2. Sergey O. Solopan

Кваліфікація: д. х. н., с.д., 02.00.01

Ідентифікатор ORCHID ID: 0000-0001-8079-3626

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417388

Місцезнаходження: , Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Академічний

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Бондар Анатолій Адольфович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Бондар Анатолій Адольфович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Коваленко Ольга Анатоліївна
Реєстратор	УкрІНТЕІ

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Тетяна Анатоліївна