

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003358

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-07-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобода Наталя Анатоліївна

2. Loboda Natalia A

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.10

Назва наукової спеціальності: Фізика напівпровідників і діелектриків

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 19-06-2019

Спеціальність за освітою: фізика твердого тіла

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

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

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.051.09

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

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

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

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

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.31.21

Тема дисертації:

1. Вплив ізоморфного заміщення іона металу на діелектричну дисперсію, магнітоелектричні взаємодії і оптико-спектральні властивості кристалів $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Me}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Me}=\text{Al}, \text{Ga}, \text{Cr}$)
2. Influence of isomorphous substitution of metal ion on the dielectric dispersion, magnetoelectric interactions and optical-spectral properties of $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Me}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{Me} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Cr}$) crystals

Реферат:

1. Робота присвячена цілеспрямованій модифікації структури, електрофізичних, магнітних і оптико-спектральних властивостей кристалів $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Me}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{DMA}(\text{Me})\text{S}$, де $\text{Me}=\text{Al}, \text{Ga}$) шляхом ізоморфного заміщення іонів Me хромом з метою отримання ефективних сегнетоелектричних і магнітоелектричних матеріалів для функціональної електроніки і комп'ютерної техніки. Отримано кристали $\text{DMAAl}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$ зі значною магнітоелектричною взаємодією та продемонстровано можливість модифікації величини та зміни знаку коефіцієнта такої взаємодії шляхом варіації концентрації Cr^{3+} . Показано, що ізоморфне заміщення іонів алюмінію іонами хрому помітно впливає на температуру переходу в сегнетоелектричну фазу, величину спонтанної поляризації і характер діелектричної дисперсії, спричиненої рухом доменних стінок в кристалах $\text{DMAAl}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$. Виявлений ефект зумовлений тим, що іони хрому генерують виникнення локальних деформацій ґратки, які через п'єзоелектричний ефект впливають як на

величину спонтанної поляризації і температуру сегнетоелектричного фазового переходу, так і на параметри діелектричної дисперсії. Водночас, ізоморфне заміщення іона металу практично не змінює відповідні параметри для $\text{DMAGa}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$. Це пояснюється ближчими розмірами іонів Cr^{3+} і Ga^{3+} на відміну від випадку пари Cr^{3+} і Al^{3+} . На основі оптико-спектральних досліджень встановлено, що комплекси $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ в усіх досліджуваних кристалах мають помітно спотворену октаедричну форму. Відповідно до проведеного симетрійного аналізу, усі метал-гідратні комплекси в досліджених твердих розчинах та у вихідних кристалах мають центр інверсії при кімнатній температурі. На основі аналізу температурної еволюції спектрів поглинання, з врахуванням даних спектроскопії КРС, зроблений висновок про те, що фазовий перехід у сегнетоелектричну фазу супроводжується значною деформацією комплексу $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ та навіть відхиленням його симетрії від центросиметричної.

2. The work is devoted to the purposeful modification of the structure, electrophysical, magnetic and optical-spectral properties of $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Me}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (DMAMeS) crystals (where Me = Al, Ga) by isomorphous substitution of Me ions with chromium in order to obtain the effective ferroelectric and magnetoelectric materials for the functional electronics and computer technique. The single crystals of $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2\text{Al}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ solid solutions were found to grow mainly in a polydomain state. It was shown that the value of chromium concentration in the two groups of ferroelastic domains with different signs of mechanical stress differs significantly – 17.6% and 20% respectively. Such a feature is caused by difference in the thermodynamic conditions of crystal growth due to the different signs of a mechanical stress in two groups of domains accompanied by different degrees of the metal ion substitution. The investigations of the nanoscale and microcrystalline structures formation on the surface of $\text{DMAAl}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}\text{S}$ single crystals kept under the conditions of high environment humidity were performed and the corresponding model was proposed. It was shown that the partial isomorphous substitution of the metal ion is followed by the nontrivial change of the ferroelectric phase transition temperature in $\text{DMAAl}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$ crystals. The largest shift of this temperature was observed for the samples with a lower chromium concentration ($x = 0.065$). The detected effect is caused by the fact that chromium ions generate the local lattice deformations that through the piezoelectric effect affect both the spontaneous polarization and phase transition temperature as well as the size and the dynamics of the dipole clusters responsible for the dielectric dispersion. At the same time, no noticeable changes were found in the dielectric properties and the ferroelectric phase transition temperature T_c for $\text{DMAGa}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$ crystals. This is explained by the closer sizes of the Cr^{3+} and Ga^{3+} ions, contrary to the case of the Cr^{3+} and Al^{3+} pair. $\text{DMAAl}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$ crystals with a significant magnetoelectric interaction were created and there was demonstrated the possibility to modify the magnitude and to change the sign of the coefficient of such an interaction by variation of the Cr^{3+} concentration. The obtained results suggest that the magnetoelectric effect may exist in the paramagnetic compounds without the noticeable magnetic anomalies near the ferroelectric phase transition. The model explaining the nontrivial dependence of the parameters of the dielectric dispersion caused by the domain walls dynamics on the chromium concentration was proposed. Chromium ions may be considered as the sources of local lattice deformations, that lead to formation of the massive dipole clusters in vicinity of the ferroelectric phase transition at lower concentrations of chromium. Increasing of its concentration is followed by fragmentation of the clusters and corresponding decrease of the dispersion of the relaxation times distribution and Vogel-Fulcher temperature, that correlates with the Curie temperature decrease. At the same time, the aforementioned local deformations hinder reorientation of the DMA dipoles responsible for the domain walls motion. This leads to increasing of the relaxation time and activation energy with increasing of Cr^{3+} ions concentration. It is shown that $\text{DMAAl}_{0,8}\text{Cr}_{0,2}\text{S}$ crystals possess a significant proton conductivity. It was concluded that similarly to initial DMAAlS crystals, the conductivity is realized through the Grotthus mechanism. A detailed analysis of absorption spectra of $\text{DMAAl}_{1-x}\text{Cr}_x\text{S}$ crystals (Me = Al, Ga) allowed to refine the energy diagram of Cr^{3+} ions in the octahedral coordination and to calculate the parameters of the crystal field and the Racah parameters. It has been shown that $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ complexes in all investigated crystals possess a considerably distorted octahedral shape. The determined parameters describing the crystalline field, as well as electron-electronic repulsion, were found to be very close for all considered compounds. This allowed to conclude that $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ octahedra in considered

DMAMe1-xCr_xS crystals are very similar by sizes (metal-distance distances) and even by a character of distortion. This conclusion is confirmed by investigations of Raman spectra. According to the performed analysis of symmetry, all metal-hydrate complexes in the investigated solid solutions and in the initial crystals possess an inversion center at room temperature. On the basis of analysis of the absorption spectra temperature evolution and the Raman spectroscopy data it was concluded that the ferroelectric phase transition is associated with a significant distortion of the [Cr(H₂O)₆]³⁺ complex and even with removing of the inversion centre.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Капустяник Володимир Богданович
2. Kapustianyk Volodymyr Bohdanovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Олександр Георгійович

2. Slivka Aleksandr G.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щур Ярослав Йосифович

2. Shchur Yaroslav Yosifovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Вакарчук Іван Олександрович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Павлик Богдан Васильович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Т.А.