Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102939

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Торчинюк Павло Васильович

2. Torchyniuk Pavlo V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 21-12-2021

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 26.218.002

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

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

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

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17

Тема дисертації:

1. Синтез, структура та властивості плівкових матеріалів на основі органо-неорганічного перовськиту CH3NH3PbI3

2. Synthesis, structure and properties of film materials based on organic-inorganic perovskite CH3NH3PbI3.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу плівок органо-неорганічних сполук CH3NH3PbI3 зі структурою перовськиту, дослідженню їх властивостей залежно від співвідношення вихідних реагентів та розчинника, пошуку шляхів підвищення стійкості плівок органо-неорганічних перовськитів, які можуть бути використанні при створенні елементів перетворення сонячної енергії в електричну. В дисертації було синтезовано органо-неорганічні перовськити CH3NH3PbI3 одностадійним осадженням із розчинів та отримано плівки методом spin-coating. Для синтезу плівок органо-неорганічних перовськитів використовували різні співвідношення вихідних реагентів PbI2 та CH3NH3I (1:1, 1:2, 1:3) та розчинники диметилформамід (DMF) та диметилсульфоксид (DMSO). Вивчено особливості утворення структури перовськиту залежно від співвідношення вихідних реагентів PbI2:CH3NH3I та розчинника DMF, DMSO.

Встановлено, що при використанні розчинника DMF та різного співвідношення PbI2:CH3NH3I, органо-неорганічний перовськит CH3NH3PbI3 починає утворюватися при обробці плівки при температурі 20-25 °C. При використанні DMSO перовськит CH3NH3PbI3 починає утворюватися при T=60 °C для співвідношення 1:1, 1:2 та при T=70 °C для співвідношення 1:3. При співвідношенні вихідних реагентів 1:1 у розчиннику DMSO не вдалося отримати однофазну плівку перовськиту, завжди присутні сліди домішкової фази (CH3NH3)2(DMF)2Pb3I8. У всіх інших випадках (розчинники DMF і DMSO) утворюється однофазна структура органо-неорганічного перовськиту одного хімічного складу, але з різною морфологією. Температура утворення однофазної плівки органо-неорганічного перовськиту залежить від співвідношення PbI2:CH3NH3I та розчинника. Встановлено, що однофазні плівки перовськиту утворюються при 115 °C, 170 °C, 175 °C для співвідношення вихідних реагентів 1:1, 1:2, 1:3 у розчиннику DMF. При використанні розчинника DMSO однофазні плівки утворюються при 190 °C, 205 °C при співвідношенні 1:2, 1:3, відповідно. Залежно від співвідношення вихідних реагентів, розчинених у DMF та температури обробки плівок, утворення органо-неорганічного перовськиту відбувається через утворення 3 проміжних сполук (1:1), через утворення 4 проміжних сполук (1:2) та через утворення 2 проміжних сполук (1:3). Крім перовськиту CH3NH3PbI3 у плівках можуть бути наявні інші проміжні сполуки: (CH3NH3)2(DMF)xPbI4, (CH3NH3)3(DMF)PbI5, (CH3NH3)2(DMF)2Pb2I6 та (CH3NH3)2(DMF)2Pb3I8. Залежно від співвідношення PbI2 та CH3NH3I, розчинених у DMSO та температури термообробки, утворення перовськиту CH3NH3PbI3 відбувається через утворення 4 проміжних сполуки (CH3NH3)2(DMSO)xPbI4, (CH3NH3)2(DMSO)2Pb3I8, PbI2•2DMSO, PbI2•DMSO. Визначено структурні параметри органо-неорганічних перовськитів (параметри елементарної комірки, об'єм комірки). Встановлено, що зі збільшенням співвідношення вихідних реагентів відбувається збільшення об'єму комірки для плівок перовськиту, що пов'язано із збільшенням кількості розчинника, що входить в структуру перовськиту. Об'єм комірки для плівок CH3NH3PbI3, отриманих у розчиннику DMSO є меншим, ніж при використанні DMF. Кристалічність плівок залежить від співвідношення вихідних реагентів, розчинника та температури обробки плівки. На залежності кристалічності від температури обробки плівки спостерігаються два максимуми: перший – зумовлений внеском кристалічних проміжних сполук та перовськиту, другий – зумовлений внеском кристалічної фази перовськиту.

2. The dissertation is dedicated to the synthesis of films of organic-inorganic compounds CH3NH3PbI3 with the structure of perovskite, the study of their properties depending on the ratio of starting reagents, and solvent, searching ways to increase the stability of organic-inorganic perovskites films, which can be used in the creation of elements for the conversion of solar energy into electricity. In the dissertation, organic-inorganic perovskites films CH3NH3PbI3 were synthesized by one-step deposition from solutions and films were obtained by spin-coating method. Different ratios of starting reagents PbI2 and CH3NH3I (1:1, 1:2, 1:3) and solvents dimethylformamide (DMF) and dimethyl sulfoxide (DMSO) were used for the synthesis of organo-inorganic perovskite films. The peculiarities of the formation of the perovskite structure depending on the ratio of the starting reagents PbI2 and CH3NH3I and the solvent DMF, DMSO has been studied. It was found that when using DMF solvent and different ratio of PbI2:CH3NH3I, organic-inorganic perovskite CH3NH3PbI3 begins to form when processing the film at a temperature of 20-25 °C. When using DMSO perovskite CH3NH3PbI3 begins to form at T = 60 °C for a ratio of 1:1, 1:2 and at T = 70 °C for a ratio of 1:3. Single-phase perovskite film is not formed at a ratio of starting reagents 1:1, the impurity compound is always present in the film. In all other cases (solvents DMF and DMSO) a single-phase structure of organic-inorganic perovskite of the same chemical composition, but with different morphology, is formed. The temperatures of formation of a single-phase film of organic-inorganic perovskite depend on the ratio of PbI2: CH3NH3I and solvent. It was found that single-phase perovskite films are formed at 115 °C, 170 °C, 175 °C for the ratio of starting reagents 1:1, 1:2, 1:3 in DMF solvent. When using the solvent DMSO single-phase films are formed at 190 °C, 205 °C at a ratio of 1:2, 1:3, respectively. Depending on the ratio of the starting reagents dissolved in DMF and the heat treatment temperature of the films, the formation of organic-inorganic perovskite occurs through the formation of 3 intermediate compounds (1:1), through the formation of 4 intermediate compounds (1:2), and through the formation of 2 intermediate compounds (1:3). In addition to CH3NH3PbI3 perovskite, other intermediate compounds may be present in the films: (CH3NH3)2(DMF)xPbI4,

(CH3NH3)3(DMF)PbI5, (CH3NH3)2(DMF)2Pb2I6 та (CH3NH3)2(DMF)2Pb3I8. Depending on the ratio of PbI2 and CH3NH3I dissolved in DMSO and the heat treatment temperature, the formation of perovskite CH3NH3PbI3 occurs through the formation of 4 intermediate compounds (CH3NH3)2(DMSO)xPbI4, (CH3NH3)2(DMSO)2Pb3I8, PbI2•2DMSO, PbI2•DMSO. The structural parameters of organic-inorganic perovskites (unit cell parameters, unit cell volume) are determined. It has been found that as the ratio of starting reagents increases, the unit cell volume for perovskite films increases, which is due to an increase in the amount of solvent included in the structure of perovskite. The unit cell volume for perovskite CH3NH3PbI3 films obtained in the DMSO solvent is smaller than when using DMF. The crystallinity of the films depends on the ratio of the starting reagents, the solvent, and the processing temperature of the film. There are two maxima of crystallinity on the temperature dependence of the crystallinity of the film: the first - due to the contribution of crystalline intermediate compounds and perovskite, the second - due to the contribution of the crystalline phase of perovskite.

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 ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Білоус Анатолій Григорович
2. Belous Anatolii H.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01

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. Колотілов Сергій Володимирович
2. Kolotilov Serhii V.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01, 02.00.04

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. Фрицький Ігор Олегович
2. Fritsky Igor O.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бережницька Олександра Степанівна
2. Berezhnytska Oleksandra S.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

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. Орисик Світлана Іванівна

2. Orysysk Svitlana I.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Трунова Олена Костянтинівна

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Трунова Олена Костянтинівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.