Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0822U100913

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-08-2022

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чорній Юрій Володимирович

2. Chornii Yurii Volodymyrovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 30-08-2022

Спеціальність за освітою: Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.051.063

Повне найменування юридичної 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

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, буд. 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: 29.19.15

Тема дисертації:

1. Вплив модифікації метал-галогенних комплексів та катіонного заміщення на природу фазових переходів в органічно-неорганічних фероїках

2. Influence of modification of the metal-halogen complexes and cationic substitution on the nature of phase transitions in the organic-inorganic ferroics

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена дослідженню впливу модифікації неорганічних аніонів та ізоморфного заміщення алкіламонієвих катіонів на структуру, фазові переходи, оптико-фізичні і магнітні властивості кристалічних фероїків, які містять у своїй структурі комплекси іонів перехідних металів. На основі рентгеноструктурних досліджень підтверджено хімічний склад монокристалів [(CH3)3NH]MnC13×2H2O (TrMAMnCl) і уточнені параметри їхньої кристалічної гратки. Вимірювання температурної та польової залежності магнітних параметрів показали, що TrMAMnCl є одновимірним антиферомагнетиком з прихованим нахилом спінів вздовж осі b. На основі дослідження температурної залежності спонтанної поляризації встановлено існування невласної сегнетоелектричної фази в кристалі [N(C2H5)4]2CoCl2Br2 (TEACCB-2) нижче температури T2=227,7 K. Наявність аномалій магнітної сприйнятливості при T2 підтверджує як феромагнітні взаємодії в околі цієї точки, так і спонтанний магнітоелектричний ефект. Запропоновано модель ємнісного

датчика магнітного поля на основі кристала [N(C2H5)4]2CoClBr3, який володіє магнітодіелектричним ефектом. Методом атомно-силової мікроскопії продемонстровано, що кристали [(CH3)2CHNH3]4Cd3Cl10 (IPACC) характеризуються сегнетоеластоелектричною (СЕЕ) доменною структурою. Виявлено специфічне травлення зразка IPACC з різною швидкістю для сусідніх СЕЕ доменів, зумовлене вологою, яка конденсується з атмосфери на поверхні кристала. Встановлено, що морфологія поверхні кристалів IPACC, які зберігаються протягом тривалого часу на відкритому повітрі, зазнає значних змін порівняно зі свіжосколотими зразками. Зокрема, на першому етапі спостерігається ріст нанокристалів, які перетворюються у мікрокристали на наступних стадіях старіння зразка. Інший тип елементів, які ростуть на поверхні монокристала – це нано- або мікростержні. На основі дослідження коливних спектрів кристала IPACCC зроблено висновок, що його структура близька до структури вихідного кристала IPACC. В обох випадках аніонний комплекс має однакову симетрію і складається з трьох метал-галогенних октаедрів з різною орієнтацією їхніх осей відносно головних кристалографічних напрямів. Іон Cu2+ у кристалі IPACCC статистично заміщує іон Cd2+. Аналіз частот та інтенсивності коливних мод при різних температурах підтвердив наявність фазових переходів в IPACCC при T1 = 358 K, T2 = 293 K і T3 = 253 K. Проведений аналіз молекулярних спектрів як вихідних кристалів IPACC, так і кристалів, легованих міддю, дозволив однозначно ідентифікувати реальні фонони, переважно залучені у формування краю поглинання. Проведені спектральні дослідження засвідчили істотний вплив електрон-фононної взаємодії на положення та форму краю поглинання в кристалах (NH4)2CuCl4×2H2O та підтвердили існування сегнетоеластоелектричного фазового переходу при температурі Tc = 200,5 K. В результаті, для фази, яка лежить вище від Tc, і температурної області нижче 100 K, низькоенергетичний «хвіст» крайової смуги описується емпіричним правилом Урбаха. На основі дослідження абсорбційних спектрів з використанням теорії кристалічного поля проаналізовані температурні зміни форми і симетрії октаедра, сформованого навколо іона Cu2+ в кристалах (NH4)2CuCl4×2H2O. Показано, що сегнетоеластоелектричний фазовий перехід супроводжується аномальною зміною ступеня тетрагонального і ромбічного спотворення октаедрів. Теоретичні розрахунки ab initio в рамках теорії функціоналу густини методом GGA+U забезпечили адекватну ідентифікацію смуг поглинання та відповідних електронних переходів. Проведено дослідження прояву розмірних ефектів у спектральних властивостях нано- та мікрокристалів [NH2(C2H5)2]2CuCl4 (DEACC), впроваджених у полімерні матриці. Встановлено, що композит з середніми розмірами нанокристалів 160 нм зазнає неперервного термохромного ФП. Продемонстровано, що мікрокомпозити на основі кристалів DEACC мають термохромні властивості, дуже подібні до властивостей монокристала. Вони зазнають дещо розмитого термохромного ФП першого роду в околі 316 K (при нагріванні) у випадку латексної матриці. Мікрокомпозити з полістирольною матрицею демонструють дуже різкий термохромний ФП при значно вищій температурі п 337 K. Запропоновано спосіб отримання термохромного мікрокомпозита на основі кристалів DEACC.

2. The work is devoted to study of the influence of inorganic anions' modification and isomorphic substitution of alkylammonium cations on the structure, phase transitions, optical-physical and magnetic properties of the crystalline ferroics, containing complexes of the transition metal ions in their structure. X-ray diffraction study confirmed the chemical composition and symmetry of the investigated [(CH3)3NH]MnC13×2H2O (TrMAMnCl) single crystals and refined their lattice parameters. Measurements of the temperature and field dependences of the magnetic parameters have shown that TrMAMnCl behaves as a canted one-dimensional antiferromagnetic with a hidden canting of the spin along the b axis. Investigations of the temperature dependence of spontaneous polarization confirmed existence of the improper ferroelectric phase in [N(C2H5)4]2CoCl2Br2 (TEACCB-2) crystal below T2=227,7 K. Presence of the anomaly of magnetic susceptibility at T2 confirms both ferromagnetic interactions around this point and the spontaneous magnetoelectric effect. A model of a capacitive magnetic field sensor based on [N(C2H5)4]2CoClBr3 crystal, which possesses a magnetodielectric effect, was proposed. Using the AFM methods it was confirmed that [(CH3)2CHNH3]4Cd3Cl10 (IPACC) crystals are characterized by the ferroelastoelectric domain structure. The observed specific etching of a sample with a different rate for the neighboring domains is caused by water condensed from atmosphere on the crystal surface. It has been found that the surface morphology of IPACC crystals kept for a long time in the open air undergoes the considerable changes

in comparison with the freshly cleaved samples. Particularly, the samples are characterized by growth of the nanocrystals on the first stage and larger microcrystals on the next stages of the sample aging. Another type of the elements observed on the surface would be considered as nano- or microrods. On the basis of the investigation of vibrational spectra of IPACCC crystal, it has been found that it`s structure is very similar to the structure of initial IPACC crystal. In all cases the anionic complex possesses the same symmetry and consists of the three distorted metal-halogen octahedra with different orientation of their axes in respect to the main crystallographic directions. Cu2+ ion in IPACCC crystal statistically replaces Cd2+ ion. The analysis of frequencies and intensities of the vibration modes at different temperatures confirmed the phase transitions in IPACCC at T1=358, T2=293 K and T3=253 K. Performed analysis of the vibrational spectra of the initial IPACC and doped with copper crystal allowed identification of the real phonons most of all involved into formation of the absorption edge. Performed spectral investigations confirmed a strong influence of the electron-phonon interaction on the position and shape of the absorption edge in (NH4)2CuCl4×2H2O crystals and existence of the ferroelastoelectric phase transition at temperature Tc=200,5 K. As a result, for the phase lying above Tc and the temperature region below 100 K the low energy tail of the edge band follows the empirical Urbach's rule. On the basis of study of (NH4)2CuCl4×2H2O crystals' absorption spectra the temperature changes of the shape and symmetry of the octahedron formed around Cu2+ ion were analyzed using the crystal field theory. It was shown that the ferroelastoelectric phase transition is accompanied by an anomalous change of the level of tetragonal and rhombic distortion of the octahedra. Ab initio theoretical calculations within the density functional theory using GGA+U method provided adequate identification of the absorption bands and corresponding electronic transitions. The detailed study of the size effects' manifestation in the spectral properties of the nano- and microcrystals of [NH2(C2H5)2]2CuCl4 (DEACC) embedded into the polymer matrices were performed. It has been found that the composite with the average nanocrystals' sizes of 160 nm undergoes a continuous thermochromic PT. It was shown that the microcomposites on the basis of DEACC crystals possess the thermochromic properties very similar to those in a bulk crystal. They undergo clear but a little diffused thermochromic PT of the first order in vicinity of 316 K (at heating) in the case of a latex matrix. The microcrystals with a polystyrene matrix show a very sharp thermochromic PT at 337 K. A method of producing of the thermochromic microcomposite based on DEACC crystals was proposed.

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. 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. Грабар Олександр Олексійович
2. Hrabar Oleksandr Oleksiyovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Андрущак Анатолій Степанович
2. Andrushchak Anatoliy Stepanovych

Кваліфікація: д. т. н., 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Карбовник Іван Дмитрович

2. Karbovnyk Ivan Dmytrovych

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. Свелеба Сергій Андрійович

2. Sveleba Serhii Andriyovych

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

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради

Болеста Іван Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні

Болеста Іван Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.