

National Academy
of Sciences of Ukraine
V.I. Vernadsky
Institute of General and
Inorganic Chemistry
Council of Young Scientists
of IGIC NASU



Національна академія
наук України
Інститут загальної та
неорганічної хімії
ім. В.І. Вернадського
Рада молодих дослідників
ІЗНХ НАНУ

**Scientific Conference of Young Scientists
of V.I. Vernadsky IGIC of NAS of Ukraine**

(Kyiv, November 16 – 17, 2017)

Abstract Book

**Наукова конференція молодих учених
ІЗНХ ім. В.І. Вернадського НАН України**

(Київ, 16 – 17 листопада 2017 року)

Збірник тез доповідей



ISBN

УДК 544+546(063)

Наукова конференція молодих учених ІЗНХ ім. В.І. Вернадського НАН України (16-17 листопада 2017 року): збірник тез доповідей. – Київ, 2017. – 40 с.

Scientific Conference of Young Scientists of V.I. Vernadsky IGIC of NAS of Ukraine (November 16-17, 2017): Book of Abstracts. – Kyiv, 2017. – 40 p.

Научная конференция молодых ученых ИОНХ им. В.И. Вернадского НАН Украины (16-17 ноября 2017 г.): сборник тезисов докладов. – Киев, 2017. – 40 с.

Збірник містить тези доповідей, які було представлено на конференції молодих учених ІЗНХ ім. В.І. Вернадського НАН України, що відбулась 16-17 листопада 2017 року. Тези відображають результати досліджень молодих дослідників інституту у галузях неорганічної, фізичної хімії та електрохімії. Текст тез подано в авторській редакції.

Рецензенти: д.х.н., проф. *Мирна Т.А.*, к.х.н., ст. наук. співр. *В'юнов О.І.*

Рекомендовано до друку Вченою радою ІЗНХ ім. В.І. Вернадського НАН України (протокол № 8 від 19 жовтня 2017 р.).

Науковий комітет конференції

член-кор. НАНУ, д.х.н., проф. *Пехньо В.І.* (голова), акад. НАНУ, д.х.н., проф. *Білоус А.Г.*, член-кор. НАНУ, д.х.н., проф. *Огенко В.М.*, член-кор. НАНУ, д.х.н., проф. *Омельчук А.О.*, д.х.н., проф. *Мирна Т.А.*, д.х.н. *Пірський Ю.К.*, д.х.н. *Трунова О.К.*, д.х.н. *Черній В.Я.*

Організаційний комітет конференції

д.х.н., проф. *Мирна Т.А.*, к.х.н., ст. наук. співр. *В'юнов О.І.*, к.х.н. *Скриптун І.М.*

© Інститут загальної та неорганічної хімії
ім. В.І. Вернадського НАН України, 2017

© Колектив авторів, 2017



© V.I. Vernadsky Institute of General and
Inorganic Chemistry NAS of Ukraine, 2017

© Authors Team, 2017

© Институт общей и неорганической химии
им. В.И. Вернадского НАН Украины, 2017

© Коллектив авторов, 2017

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ

Відкриття конференції

16 листопада, 10:00.

Секція 1. Неорганічна та фізична хімія

16 листопада, 10:10.

Голова – Черній В.Я., д.х.н.

1. **Reshytko** Borys Anatoliiiovych (IGIC NASU, department № 6) Synthesis and Properties of Doped Barium Titanate with High Dielectric Permittivity
2. **Довбій** Ян Михайлович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 2-1) Біскуркумінат фталоціаніну цирконію – синтез та спектральні властивості
3. **Іваненко** Олександр Петрович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3) Спектральні характеристики простих та складних фторидних сполук РЗЕ (II)
4. **Іваха** Надія Борисівна (ІЗНХ НАНУ, відділ № 5) Порівняння спектрально-люмінесцентних властивостей полімерів та кополімерів на основі β -дикарбонільних координаційних сполук Ln(III)
5. **Погоренко** Юлія Владимировна (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3) Синтез та електропровідність твердих розчинів геторовалентного заміщення на основі CeF_3
6. **Федорчук** Олександр Петрович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 6) Синтез і властивості феромагнітних матеріали зі структурою шпінелі та композиційних структур на їх основі
7. **Штоквиш** Ольгерд Олександрович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 2) Будова ряду комплексів естерів ацетооцтової кислоти в залежності від природи компонентів реакційного середовища
8. **Милованова** Ольга Игоревна (ИОНХ НАНУ, отдел № 1) Физико-химические и газочувствительные свойства модифицированного диоксида олова
9. **Селин Роман Александрович** (ИОНХ НАНУ, отдел № 2-1) Синтез функциона-лизированных макроциклических лигандов-темплатов для дизайна упорядоченных структур

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ

Секція 2. Фізична хімія та електрохімія

17 листопада, 10:00.

Голова – Пірський Ю.К., д.х.н.

1. **Смілик** Віталій Олегович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 1) Фотоелектрохімічні властивості плівок на основі ванадату вісмуту та міді
2. **Кулешов** Сергій Володимирович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3) Структурні та морфологічні особливості нанорозмірних електролітичних композитів W|WC|C
3. **Фоманюк** Сергій Станіславович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 1) Електросинтез нанорозмірних часток CdSe, CdTe і ZnSe для РК матриці на основі каприлату кадмію
4. **Крупеннікова** Оксана Сергіївна (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3-1) Вплив срібла при формуванні оболонкових нанокompозитів $\text{Fe}_3\text{O}_4 @ \text{Ag}^0$ на електровідновлення кисню
5. **Zmievskii** Yuriy Grigorievich (National University of food technologies) Baromembrane methods for separation of disillery stillage
6. **Білик** Сергій Володимирович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 7) Електроосадження функціональних суперсплавів Ni–Re
7. **Zakharov** Volodymyr Volodymyrovych (National University of food technologies) Ozonation of nanofiltrative permeate of whey
8. **Діамант** Віктор Анатолійович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 8) Фізико-хімічні властивості тетраметиламоній біс(саліцило)борату
9. **Панчишин** Тарас Миколайович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3-1) Електрохімічна система постачання та акумулювання енергії на основі воднево-кисневого паливного елемента
10. **Галагуз** Вадим Анатолійович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 1) Синтез та електрохімічні властивості нанокompозиту LiFePO_4/C

ПРОГРАМА КОНФЕРЕНЦІЇ

Стендові доповіді

1. **Кулешов** Сергій Володимирович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3) Термічна стабільність електролітичного нанокристалічного карбїду вольфраму WC
2. **Шлапа** Юлія Юріївна (ІЗНХ НАНУ, відділ № 6) Створення неорганічних core/shell наноструктур на основі магнітних наночастинок (La,Sr)MnO₃
3. **Litynska** Marta Igorivna (National Technical University of Ukraine «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute») Influence of carrier type on arsenic (V) removal by activated carbon-iron (III) oxyhydroxide adsorbents
4. **Куций** Андрій Васильович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 3-1) Закономірності виділення водню з води на катодах на основі монокарбїду вольфраму з добавками Ag, Cu, Ti
5. **Чабан** Марія Олександрівна (ІЗНХ НАНУ, відділ № 4-1) Нові комозиційні сорбційні матеріали для селективного видалення йонів літію
6. **Слободянюк** Иван Александрович (ИОНХ НАНУ, отдел № 1) Электродные материалы для биполярной фотоэлектрохимической системы с аккумулярованием водорода
7. **Посох** Валерий Олегович (ИОНХ НАНУ, отдел № 7) Коррозионные испытания конструкционных сталей теплообменного оборудования АЭС
8. **Вакаров** Сергій Васильович (ІЗНХ НАНУ, відділ № 2-1) Дослідження квантовомеханічними розрахунками переходів між метастабільними конформаціями гексафенїлзаміщеного клатрохелату заліза (II)

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF DOPED BARIUM TITANATE WITH HIGH DIELECTRIC PERMITTIVITY

Reshytko B.A., V'yunov O. I.

*V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry NAS of Ukraine
Solid state chemistry department
artasil@ukr.net*

Materials exhibiting a high dielectric permittivity (HDP) $\epsilon' > 10^3$ have recently gained considerable attention. HDP behavior is of technical importance for applications and devices such as random access memories based on capacitive elements and low loss capacitors [1]. HDP of ferroelectric materials can be generated by ferroelectric polarization, charge density waves, hopping mechanism of conduction, occurrence of metal-dielectric transition, as well as internal interface at the grain boundaries. Most of these mechanisms are peculiar to ceramic samples of doped BaTiO_3 [2].

The purpose of this study work is to investigate the electrical-physical properties of ceramic samples of BaTiO_3 -based semiconductor ferroelectrics in a wide frequency range and to find out the mechanisms of polarization that contribute to the value of HDP.

According to obtained data, HDP properties are inherent in doped barium titanate ceramics and can be explained by the presence of interfaces at the boundaries of grains, ferroelectric polarization and metal-dielectric transitions (Fig. 1).

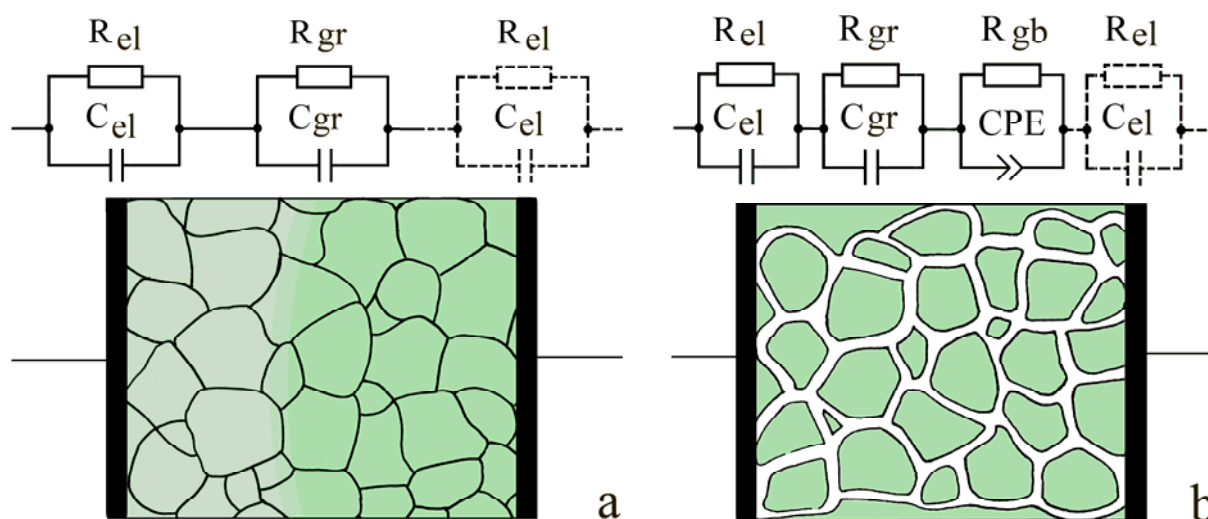


Fig. 1. Equivalent circuits and schematic representation of the microstructure of dielectric (a) and semiconductor (b) ceramics. C_{el} , R_{el} , R_{gr} , C_{gr} , R_{gb} , CPE are the resistance and the capacity of the electrodes, the volume and grain boundaries, respectively. Elements of the circuit that simulate the wires are omitted for clarity.

On samples Al (ohmic) and Ag (blocking) electrodes were applied. Fig. 2 shows that for dielectric barium titanate, the main contribution to dielectric permittivity is ferroelectric polarization (Area I). In the case of semiconductor barium

titanate with aluminum electrodes, the contribution of ferroelectric polarization is, in the order of magnitude, close to the values in the dielectric material (Fig. 2a, Area I). The hopping mechanism of conduction and interfaces at the grain boundaries make a significant contribution to the dielectric permittivity (Area II). Contribution of the interface metal-semiconductor for semiconductor barium titanate with silver electrodes (Area III) provides a constant ϵ value in a wide frequency range (curve 2). Fig. 2 and calculations using equivalent circuit show that the magnitude of the contribution to the dielectric permittivity is as follows: interface at the grain boundaries, hopping conductivity, electrode interface (blocking Ag electrode), and ferroelectric polarization.

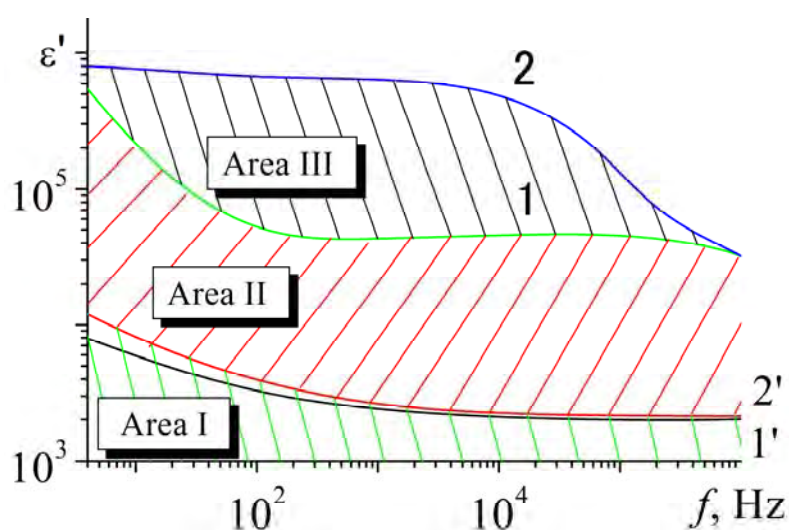


Fig. 2. Dielectric permittivity (ϵ') of semiconductor (1, 2) and dielectric (1', 2') samples with Al (ohmic) (1, 1') and Ag (blocking) (2, 2') electrodes.

The samples of dielectric and semiconductor barium titanate have been synthesized and their electrical and physical properties have been studied. The HDC value of semiconductor barium titanate ceramic significantly higher compared to dielectric samples due to the formation of additional polarization at the grain boundaries and metal-dielectric transitions in the case of silver blocking electrodes.

The work was carried out with the financial support from the research program of the Ukrainian National Academy of Sciences "New functional substances and materials for chemical production" (Fine Chemicals).

References

1. Lunkenheimer, P.; Bobnar, V.; Pronin, A.; Ritus, A.; Volkov, A.; Loidl, A., Origin of Apparent Colossal Dielectric Constants. *Phys. Rev. B* **2002**, 66 (5), 052105-1–052105-4.
2. V'yunov, O. I.; Reshytko, B. A.; Belous, A. G., Synthesis and Properties of Semiconductor BaTiO₃ with a Colossal Permittivity. *Ukr. Khim. Zh.* **2017**, 83 (7), 42-50.