

АНОТАЦІЯ

Мокляк М. Г. Синтез, структура, каталітичні та термомагнітні властивості нанокомпозитів на основі Nd-вмісного мідного фериту. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії в галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали. – Карпатський національний університет імені Василя Стефаника, Міністерство освіти і науки України, Івано-Франківськ, 2026.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню закономірностей формування шпінельної структури мідних феритів і Nd-вмісних нанокомпозитів на їх основі за умов одностадійного синтезу модифікованими методами золь-гель автоспалювання та встановленню взаємозв'язків між умовами їх отримання, структурно-морфологічними параметрами, фізико-хімічними властивостями та функціональними характеристиками в каталітичних системах очищення води і колоїдних системах індукційного нагріву.

Обґрунтування актуальності обраної теми дисертаційного дослідження, мета дослідження, основні завдання, наукова новизна і практична цінність роботи висвітлені у вступі.

Перший розділ містить критичний аналіз літературних джерел щодо сучасного стану та основної проблематики наукових досліджень у напрямку синтезу і потенціалу застосування феритів міді і композитів на їх основі в сферах каталізу і магнітної гіпертермії. Розглянуто поширені методи синтезу – співосадження, гідротермальний/сольвотермальний методи та золь-гель синтез – з точки зору контролю фазової чистоти, впливу на кристалічність, розмір, морфологію і хімію дефектів частинок. Встановлено взаємозв'язок «структура-властивість» для потенційного застосування у фотокаталітичних системах очищення води і колоїдних системах індукційного нагріву. Підсумовано практичні обмеження, такі як фазова стабільність, відтворюваність катіонних/дефектних станів, деградація та регенерація матеріалів. Це підкреслює

необхідність розробки раціонального дизайну матеріалів екологічного і медико-біологічного призначення та стандартизованих протоколів їх оцінки для створення масштабованих технологій на основі CuFe_2O_4 із можливістю багаторазового використання.

У другому розділі описані застосовані методи синтезу, варіації та модифікації технологічних умов для отримання нанокompatитів на основі фериту міді з можливістю різного ступеня заміщення катіонами Nd. Представлено методи характеристизації та аналізу матеріалів з відповідним описом дослідних установок і приладів та конкретних умов проведення експериментальних досліджень. Окрему увагу приділено опису методик проведення фотокаталітичних досліджень та досліджень ефективності потенційного застосування отриманих матеріалів в магнітній гіпертермії, зокрема придатності до індукційного нагрівання в магнітному полі.

У третьому розділі здійснено аналіз впливу ряду технологічних факторів на етапі синтезу методом золь-гель автоспалювання таких як рівень рН реакційного середовища, стехіометрія прекурсор/хелат, включення легуючої домішки Nd та температура і тип атмосфери постсинтезного відпалу на структурно-морфологічні і фізико-хімічні характеристики феритів міді і нанокompatитів на їх основі. Встановлено, що кислотність середовища суттєво впливає на процеси структурування вже на стадії формування гелю, що визначає кінцевий фазовий склад матеріалу як метастабільну високотемпературну форму фериту міді з наявними домішками делафоситу та його функціональні характеристики. Застосування постсинтезного відпалу в діапазоні $400-800^\circ\text{C}$ розкрило тетрагонально-кубічну еволюцію шпінельної структури нанорозмірного фериту міді в різних атмосферах термічного відпалу та її зв'язок з фізичними характеристиками цих матеріалів. Встановлено, що відпал ініціює подальше повне перетворення додаткової фази делафоситу на високотемпературну кубічну форму фериту міді із включеннями фази гематиту на пізніх етапах відпалу, а при подальшому охолодженні зафіксовано повну трансформацію в стабільну тетрагональну форму з наростанням фази гематиту при вищих температурах

відпалу. Структурна еволюція зумовлює зміну механізму провідності із стрибкового для кубічної структури на змішаний для тетрагональної форми фериту міді.

Контрольовані варіації стехіометрії прекурсор/хелат із включенням легуючої домішки Nd, за умови ініціації надлишку чи дефіциту хелатуючого агента в реакційній суміші, дозволяють формувати відповідно дво- та трикомпонентні гетеропереходи (Тип–II) з каскадним розташуванням енергетичних зон типу $\text{CuFeO}_2/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ та $\text{CuO}/\text{CuFeO}_2/\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$. Це вирішує головну проблему швидкої електрон-діркової рекомбінації для базового фериту міді в результаті просторового розділення зарядів на міжфазному інтерфейсі в результаті різного типу провідності домінуючої шпінельної фази та ініційованих додаткових фаз.

В роботі запропоновано механізм формування композитного матеріалу при заміщенні іонами Nd, що передбачає ініційований катіонний міжпозиційний перерозподіл в шпінельній структурі внаслідок розмірного ефекту з вимушеною міграцією іонів Fe^{3+} в тетраедричні позиції і частковим витісненням Cu^{2+} із структури фериту. За умови дефіциту хелатуючого агента це створює передумови до паралельного формування на етапі дендритного росту поряд із додатковою фазою делафоситу деякої кількості оксиду міді (II). Збільшення ступеня заміщення іонами Nd інтенсифікує ці процеси і призводить до зменшення розміру кристалітів домінуючої фази фериту, а також до перерозподілу вмісту додаткових фаз з переважанням складової одинарного оксиду. Застосування модифікації методу золь-гель автоспалювання з етапом росту дендритної структури забезпечує розвиток макропористої губчастої морфології нанокompозитів, основним елементом яких є сферичні наночастинки ($\sim 20\text{-}30$ нм) домінуючої фази фериту міді декоровані поверхневими наноострівцями фаз оксиду міді (II) та делафоситу.

У четвертому розділі описані результати фотокаталітичних досліджень синтезованих матеріалів. Дослідження зонної структури підтверджують формування гетеропереходів (Тип–II) з каскадним розташуванням енергетичних

зон $\text{CuO/CuFeO}_2/\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$. Для композиту $\text{CuFeO}_2/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ отриманого за умови $\text{pH}=1$ з мінімальними розмірами кристалітів фериту (≈ 12 нм) та максимальним вмістом дельтафоситу (11%), досягнуто швидкості деградації $0,0206 \text{ хв}^{-1}$. Встановлено, що тетрагонально-кубічна еволюція шпінельної структури забезпечує високу ефективність фотокаталізу для обох кристалічних форм порядку $\approx 0,021 \text{ хв}^{-1}$ для малахіту зеленого за умови обмеження розмірів кристалітів < 24 нм. З'ясовано, що при зростанні вмісту H_2O_2 ступінь деградації метиленового синього зростає нелінійно з виходом на плато в діапазоні 0,1-0,35 моль%, а кисле середовище ($\text{pH}=2$) сприяє фотокаталізу і забезпечує 100% деструкцію барвника за 160 хв.

Для композитів $\text{CuFeO}_2/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ із зниженим вмістом дельтафоситу (8%), які отримані за умови надлишку (25%) хелатуючого агента, аналіз фотокаталізу також засвідчує ефективну деградацію усіх трьох застосованих типів барвників із збільшенням швидкості реакції в ряду родамін Б $\rightarrow$ метиленовий синій $\rightarrow$ малахітовий зелений від $k = 0,0155 \text{ хв}^{-1}$ до $0,0184 \text{ хв}^{-1}$.

У випадку композитів $\text{CuO/CuFeO}_2/\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ зміни ширини забороненої зони фериту при заміщенні іонами Nd формуються в результаті конкуруючого впливу розмірного ефекту для нанокристалітів, внеску 4f станів допанта та наростаючого структурного безладу, що призводить до формування локального мінімуму 2,82 еВ для складу $\text{CuNd}_{0,05}\text{Fe}_{1,95}\text{O}_4$. Фотокаталіз в цих системах зосереджений на подвійних гетеропереходах, які забезпечують паралельний багатоцентровий процес із генерацією комплексу радикалів на межовому інтерфейсі. Синергетичне підсилення фотокаталізу фіксується для ступенів заміщення Nd $x=0,05$ та $0,09$ як прояв таких конкуруючих впливів як мінімізація ширини забороненої зони фериту ($x=0,05$), мінімізація розміру нанокристалітів ($x=0,09$), максимальний вміст фази оксиду міді (7,6% для $x=0,09$) та величина і знак потенціалу поверхні каталізатора (+34,24 мВ для $x=0,05$). Максимальні швидкості реакції становлять $0,0186 \text{ хв}^{-1}$ для метиленового синього та $0,0116 \text{ хв}^{-1}$ для конго червоного у випадку заміщення Nd $x=0,09$. Для метиленового синього зафіксовано механізм фотокаталізу із зміною порядку реакції з нульового на

перший, а для конго червоного виявлений перехід в зону часткового блокування реакції в результаті пасивації поверхні інтермедіатами.

Для модельної катіон-аніонної суміші формування нейтральних комплексів на етапі темного режиму стабілізації із введеним каталізатором забезпечує уникнення ефекту електростатичного відштовхування і зумовлює просторове зближення молекул забруднювачів на активній поверхні нанокompозитів. Це спричиняє високосинхронний характер їх фотодеструкції не як двох ізольованих барвників, а як один цілісний супрамолекулярний комплекс. Слід відмітити нелінійну динаміку процесу деструкції суміші з наявними зонами сповільнення реакції, що сильніше проявляється для метиленового синього в силу його легшої деструкції порівняно із конго червоним. Зниження максимального ступеня деградації обидвох барвників порівняно із фотокаталізом їх одинарних розчинів становить порядку $\approx 20\%$, причому найвищу фотокаталітичну активність також демонструють зразки із заміщенням Nd $x=0,09$ та $0,05$. Зокрема, для зразка із $x=0,09$ зафіксовано значення швидкостей реакцій відповідно $0,0041 \text{ хв}^{-1}$ для метилен блакитного та $0,0030 \text{ хв}^{-1}$ для конго червоного із досягненням приблизно однакового ступеня їх максимальної деградації порядку $\approx 73\%$.

У п'ятому розділі описано результати дослідження магнітних та термомагнітних властивостей окремих синтезованих систем для виявлення потенціалу їх застосування в магнітній гіпертермії. Встановлено, що тетрагонально-кубічна еволюція шпінельної структури спричинена термічним відпалом суттєво впливає на намагніченість насичення та коерцитивну силу, безпосередньо визначаючи параметри нагрівання в змінному магнітному полі. Значення SAR $\sim 30\text{--}32 \text{ Вт/г}$ та ILP $\sim 1,5\text{--}1,6 \text{ нГн}\cdot\text{м}^2/\text{кг}$, отримані за моделями Бокса–Лукаса та охолодження Ньютона, показали, що наночастинки виявляють ефективний індукційний нагрів, причому відпалені зразки зберігають термомагнітні характеристики.

Для систем $\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ усі зразки демонструють чітко виражені петлі гістерезису, які є характерними для феримагнітних матеріалів. Максимальна намагніченість $62,1 \text{ А}\cdot\text{м}^2/\text{кг}$ і висока анізотропія ($K_1 = 0,37 \times 10^5 \text{ ерг/см}^3$)

зафіксована для зразка з $x=0,05$, який також демонструє найвищу колоїдну стабільність із максимальним значенням дзета-потенціалу (+34,24 мВ) та помірний час релаксації τ_N (14,00 нс). Синергія цих параметрів зумовлює найвищі значення SAR (понад 33 Вт/г) та ILP понад 0,163 нГн·м²/кг для цього матеріалу, що вказує на високу здатність до нагрівання у клінічно релевантних умовах прикладеного змінного магнітного поля (23,8 кА/м, 357 кГц). Однак, ця залежність не є лінійною, оскільки зразок із $x = 0,11$ показав високий SAR (33,43 Вт/г) попри нижчу намагніченість насичення 46,91 А·м²/кг, що вказує на підсилюючий вплив інших факторів, таких як анізотропія та релаксація. Отримані результати свідчать про те, що помірне заміщення Nd дозволяє прецизійно контролювати режим релаксації Нєєля і вказують на стратегію для конструювання наночастинок шпінельних феритів з оптимізованим термічним відгуком для біомедичних застосувань.

Ключові слова: ферит, композит, мідь, залізо, неодим, оптичні властивості, електронна структура, провідність, магнітна структура, каталізатор, фотокаталіз, каталітична активність, гіпертермія, мессбауєрівська спектроскопія, імпедансна спектроскопія.

SUMMARY

Mokliak M.G. Synthesis, Structure, Catalytic and Thermomagnetic Properties of Neodymium-Doped Copper Ferrite-Based Nanocomposites. – A qualifying scientific work submitted as a manuscript.

Dissertation submitted for the degree of Doctor of Philosophy in the field of knowledge 10, Natural Sciences, specialty 105, Applied Physics and Nanomaterials. – Vasyl Stefanyk Carpathian National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, Ivano-Frankivsk, 2026.

This dissertation is dedicated to investigating the patterns of spinel structure formation in copper ferrites and neodymium-modified nanocomposites based on them, synthesized in a single stage by modified sol-gel autocombustion method. The work

also aims to establish relationships between synthesis conditions, structural and morphological parameters, physicochemical properties, and functional performance in catalytic water purification systems and colloidal systems for induction heating.

The justification of the relevance of the chosen topic, the aim of the research, the main tasks, scientific novelty, and practical value of the work are highlighted in the Introduction.

The first chapter presents a critical analysis of literature sources concerning the current state and key research issues related to the synthesis of copper ferrites and copper ferrite-based composites, as well as their potential applications in catalysis and magnetic hyperthermia. Common synthesis methods, including coprecipitation, hydrothermal/solvothermal approaches, and sol–gel synthesis, are considered in terms of phase-purity control and their influence on the crystallinity, size, morphology, and defect chemistry of the particles. Structure–property relationships are analyzed with regard to potential applications in photocatalytic water purification systems and colloidal induction-heating systems. Practical limitations, including phase stability, reproducibility of cationic and defect states, material degradation, and regeneration, are summarized. This highlights the need to develop rational design strategies for materials intended for environmental and biomedical applications, as well as standardized evaluation protocols for creating scalable CuFe_2O_4 -based technologies suitable for repeated use.

The second chapter describes the synthesis methods employed, including variations and modifications of the technological conditions used to obtain copper ferrite-based nanocomposites with different degrees of Nd cation substitution. It presents the methods of material characterization and analysis, along with descriptions of the experimental setups, instruments, and specific conditions used in the experimental studies. Special attention is given to the methodologies for photocatalytic investigations and for assessing the potential applicability of the obtained materials in magnetic hyperthermia, particularly their suitability for induction heating in a magnetic field.

The third chapter analyzes the influence of a number of technological factors at the stage of sol–gel autocombustion synthesis on the structural, morphological, and physicochemical characteristics of copper ferrites and nanocomposites based on them. These factors include the pH level of the reaction medium, the precursor-to-chelating-agent stoichiometry, the incorporation of the Nd dopant, and the temperature and atmosphere of post-synthesis annealing. It was established that the acidity of the medium significantly affects the structuring processes already at the gel-formation stage, thereby determining both the final phase composition of the material, represented by a metastable high-temperature form of copper ferrite with delafossite impurities, and its functional characteristics. The application of post-synthesis annealing in the range of 400–800 °C revealed the tetragonal-to-cubic evolution of the spinel structure of nanosized copper ferrite under different thermal annealing atmospheres and its relationship with the physical characteristics of these materials. It was found that annealing initiates the subsequent complete transformation of the additional delafossite phase into the high-temperature cubic form of copper ferrite, with the appearance of hematite-phase inclusions at later stages of annealing. During subsequent cooling, a complete transformation into the stable tetragonal form was recorded, accompanied by an increase in the hematite phase content at higher annealing temperatures. The structural evolution causes a change in the conduction mechanism from hopping conduction, characteristic of the cubic structure, to a mixed mechanism characteristic of the tetragonal form of copper ferrite.

Controlled variations in the precursor-to-chelating-agent stoichiometry, combined with the incorporation of the Nd dopant and the introduction of either an excess or a deficiency of the chelating agent into the reaction mixture, make it possible to form two- and three-component type-II heterojunctions with cascade band alignment, namely $\text{CuFeO}_2/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ and $\text{CuO}/\text{CuFeO}_2/\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$, respectively. This addresses the key problem of rapid electron–hole recombination in pristine copper ferrite through spatial charge separation at the phase interfaces, due to the different conductivity types of the dominant spinel phase and the induced secondary phases.

The work proposes a mechanism for the formation of the composite material upon substitution with Nd ions. This mechanism involves induced cation redistribution between crystallographic sites in the spinel structure due to the size effect, with the driven migration of Fe^{3+} ions to tetrahedral sites and partial displacement of Cu^{2+} ions from the ferrite structure. Under conditions of chelating-agent deficiency, this favors the parallel formation of a fraction of copper(II) oxide during the dendritic growth stage, along with the additional delafossite phase.

An increase in the degree of Nd-ion substitution intensifies these processes and leads to a decrease in the crystallite size of the dominant ferrite phase, as well as to a redistribution of the secondary-phase content, with the copper(II) oxide component becoming predominant. The modification of the sol–gel autocombustion method by introducing a dendritic-structure growth stage promotes the development of a macroporous sponge-like morphology of the nanocomposites. The main structural elements of this morphology are spherical nanoparticles ($\sim 20\text{--}30$ nm) of the dominant copper ferrite phase decorated with surface nanoislands of copper(II) oxide and delafossite phases.

The fourth chapter presents the results of photocatalytic studies of synthesized materials. Band-structure analysis confirms the formation of type-II heterojunctions with cascade band alignment in the $\text{CuO/CuFeO}_2/\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ system. For the $\text{CuFeO}_2/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ composite obtained at $\text{pH} = 1$, characterized by the minimum ferrite crystallite size of approximately 12 nm and the maximum delafossite content of 11%, a degradation rate of 0.0206 min^{-1} was achieved. It was established that the tetragonal–cubic evolution of the spinel structure provides high photocatalytic efficiency for both crystalline forms, with a rate of approximately 0.021 min^{-1} for malachite green, provided that the crystallite size is limited to less than 24 nm. It was found that, with increasing H_2O_2 content, the degree of methylene blue degradation increases nonlinearly and reaches a plateau in the range of 0.1–0.35 mol%, while an acidic medium ($\text{pH} = 2$) promotes photocatalysis and results in complete dye degradation within 160 min.

For $\text{CuFeO}_2/\text{CuFe}_2\text{O}_4$ composites with a reduced delafossite content of 8%, obtained under conditions of a 25% excess of the chelating agent, photocatalytic analysis also demonstrates efficient degradation of all three types of dyes used, with an increase in the reaction rate in the series rhodamine B $\rightarrow$ methylene blue $\rightarrow$ malachite green, from $k = 0.0155 \text{ min}^{-1}$ to 0.0184 min^{-1} .

In the case of $\text{CuO}/\text{CuFeO}_2/\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ composites, changes in the ferrite band gap upon substitution with Nd ions result from the competing effects of the size effect for nanocrystallites, the contribution of the dopant 4f states, and increasing structural disorder, leading to the formation of a local minimum of 2.82 eV for the $\text{CuNd}_{0.05}\text{Fe}_{1.95}\text{O}_4$ composition. Photocatalysis in these systems is concentrated at double heterojunctions, which provide a parallel multicenter process involving the generation of a complex of radicals at the interfacial boundary.

Synergistic enhancement of photocatalysis is observed for Nd substitution degrees of $x = 0.05$ and 0.09 as a manifestation of competing effects, including minimization of the ferrite band gap at $x = 0.05$, minimization of the nanocrystallite size at $x = 0.09$, the maximum content of the copper oxide phase of 7.6% at $x = 0.09$, and the magnitude and sign of the catalyst surface potential of +34.24 mV at $x = 0.05$. The maximum reaction rates are 0.0186 min^{-1} for methylene blue and 0.0116 min^{-1} for Congo red in the case of Nd substitution at $x = 0.09$. For methylene blue, a photocatalytic mechanism involving a change in the reaction order from zero to first order was recorded, whereas for Congo red, a transition into a region of partial reaction blocking due to surface passivation by intermediates was revealed.

For the model cation–anion mixture, the formation of neutral complexes during the dark stabilization stage in the presence of the catalyst prevents electrostatic repulsion and brings pollutant molecules into closer proximity on the active surface of the nanocomposites. This results in highly synchronized photodegradation behavior, in which the dyes are degraded not as two isolated species but as a single supramolecular complex. The degradation of the mixture exhibits nonlinear dynamics, with regions of reaction slowdown that are more pronounced for methylene blue due to its easier degradation compared with Congo red. The decrease in the maximum degree of

degradation of both dyes, compared with photocatalysis in their single-dye solutions, is approximately 20%, while the highest photocatalytic activity is again demonstrated by the samples with Nd substitution degrees of $x = 0.09$ and 0.05 . In particular, for the sample with $x = 0.09$, reaction rate constants of 0.0041 min^{-1} for methylene blue and 0.0030 min^{-1} for Congo red were recorded, with both dyes reaching approximately the same maximum degree of degradation of about 73%.

The fifth chapter presents the results of the investigation of the magnetic and thermomagnetic properties of selected synthesized systems in order to assess their potential for application in magnetic hyperthermia. It was established that the tetragonal–cubic evolution of the spinel structure induced by thermal annealing significantly affects the saturation magnetization and coercivity, thereby directly determining the heating parameters in an alternating magnetic field. SAR values of approximately 30–32 W/g and ILP values of approximately $1.5\text{--}1.6 \text{ nH}\cdot\text{m}^2/\text{kg}$, obtained using the Box–Lucas and Newton’s cooling models, indicate efficient induction-heating performance of the nanoparticles, while the annealed samples retain their thermomagnetic characteristics.

For the $\text{CuNd}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$ systems, all samples exhibit well-defined hysteresis loops characteristic of ferrimagnetic materials. The maximum magnetization of $62.1 \text{ A}\cdot\text{m}^2/\text{kg}$ and high anisotropy ($K_1 = 0.37 \times 10^5 \text{ erg/cm}^3$) were recorded for the sample with $x = 0.05$, which also demonstrates the highest colloidal stability, with a maximum zeta potential of +34.24 mV, and a moderate Néel relaxation time τ_N of 14.00 ns. The synergy of these parameters results in the highest SAR values, exceeding 33 W/g, and ILP values above $0.163 \text{ nH}\cdot\text{m}^2/\text{kg}$ for this material, indicating high induction-heating efficiency under applied alternating magnetic-field conditions relevant to magnetic hyperthermia (23.8 kA/m, 357 kHz).

However, this dependence is not linear, since the sample with $x = 0.11$ shows a high SAR value of 33.43 W/g despite a lower saturation magnetization of $46.91 \text{ A}\cdot\text{m}^2/\text{kg}$, indicating the enhancing influence of other factors, such as anisotropy and relaxation. The obtained results demonstrate that moderate Nd substitution enables precise control over the Néel relaxation regime and indicate a strategy for designing

spinel ferrite nanoparticles with an optimized thermal response for biomedical applications.

Keywords: ferrite, composite, copper, iron, neodymium, optical properties, electronic structure, conductivity, magnetic structure, catalyst, photocatalysis, catalytic activity, hyperthermia, mössbauer spectroscopy, impedance spectroscopy.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Публікації, що індексуються в міжнародних наукометричних базах:

1. Moklyak, V., Chelyadyn, V., Hrubak, A., Ostafiychuk, B., Kotsyubynsky, V., Mizilevska, M., **Moklyak, M.**, Lisovsky, R., Yavorskyi, Y. (2020). Synthesis, structure, optic and photocatalytic properties of anatase/brookite nanocomposites. *Journal of Nano Research*, 64, 39-48. (SCOPUS, Q3).

DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.64.39>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/85097368967>

2. Bazaluk, O., Hrubak, A., Moklyak, V., **Moklyak, M.**, Kieush, L., Rachiy, B., Gasyuk, I., Yavorskyi, Y., Koveria, A., Lozynskyi, V., Fedorov, S. (2021). Structurally dependent electrochemical properties of ultrafine superparamagnetic ‘Core/Shell’ γ -Fe₂O₃/Defective α -Fe₂O₃ composites in hybrid supercapacitors. *Materials*, 14(22), 6977. (SCOPUS, Q2).

DOI: <https://doi.org/10.3390/ma14226977>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/85119717776>

3. Hrubak, A., Moklyak, V., Yavorsky, Y., Onuskiv, B., Chelyadyn, V., Karpets, M., **Moklyak, M.**, Ivanichok, N., Ilnitsky, N. (2022). Electroconductive properties of carbon biocomposites formed by the deposition method. *Physics and Chemistry of Solid State*, 23(2), 302-310. (SCOPUS, Q4).

DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.23.2.302-310>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/85133689472>

4. Mazurenko, J., Kaykan, L., Sijo, A. K., Moiseienko, M., Kuzyshyn, M., Ostapovych, N., & **Moklyak, M.** (2023). The influence of reaction medium pH on the structure, optical, and mechanical properties of nanosized Cu-Fe ferrite synthesized by the sol-gel autocombustion method. *Journal of Nano Research*, 81, 65-84. (SCOPUS, Q3).

DOI: <https://doi.org/10.4028/p-d2fQaH>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/85182978353>

5. Mazurenko, J., Kaykan, L., Moklyak, V., **Moklyak, M.**, Moiseienko, M., Ostapovych, N., & Petryshyn, M. (2025). Inductive Heating Behavior of Copper Ferrite Magnetic Nanoparticles. *Physics and Chemistry of Solid State*, 26(2), 312-321. (SCOPUS, Q4).

DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.26.2.312-321>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/105011090173>

6. **Mokliak, M.**, Kaykan, L., Mazurenko, J., Moiseienko, M., Kuzyshyn, M., Dovbnia, I., Ilnitsky, N., Yuryev, S., Mokliak, V. (2025). Influence of Neodymium Doping on the Thermomagnetic Response and Colloidal Behavior of Copper Ferrite Nanoparticles. *Physics and Chemistry of Solid State*, 26(3), 564-577. (SCOPUS, Q4).

DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.26.3.564-577>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/105018688214>

7. **Mokliak, M.**, Ilnytskyi, R., Kaykan, L., Mazurenko, Y., Turovska, L., Moiseienko, M., Mokliak, V., Sheketa, V. (2026). Neodymium Doped Copper Ferrite Nanocomposites as an Effective Magnetic Catalyst for the Organic Dyes Decomposition. *Physics and Chemistry of Solid State*, 27(1), 215–225. (SCOPUS, Q4).

DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.27.1.215-225>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/105034919269>

8. Mazurenko, J., Turovska, L., **Moklyak, M.**, Kaykan, L., Moklyak, V. (2026). Synthesis, Challenges, and Application Potential of Copper Ferrite Nanoparticles. *Physics and Chemistry of Solid State*, 27(2), 284–298. (SCOPUS, Q4).

DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.27.2.284-298>

URL: <https://journals.pnu.edu.ua/index.php/pcss/article/view/10471>

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації (тези доповідей на конференціях, що індексуються в міжнародних наукометричних базах):

9. Mazurenko, J., Kaykan, L., **Moklyak, M.**, Bandura, K., Gondek, L. and Żywczak, A. Magnesium Substituted Copper Ferrite as an Effective Catalyst for the Organic Dyes Decomposition. *Nanomaterials: Applications & Properties (NAP) : 2024 IEEE 14th International Conference*, Riga, Latvia, 2024. P. 1–4. (SCOPUS).

DOI: <https://doi.org/10.1109/NAP62956.2024.10739689>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/85212241932>

10. Mazurenko, J., Kaykan, L., Michalik, J. M., Szostak, E., **Moklyak, M.** and Mazurenko, O. Influence of Rare Earth Substitution on the Photocatalytic Efficiency of Spinel Ferrite Nanoparticles. *Nanomaterials: Applications & Properties (NAP) : 2025 IEEE 15th International Conference*, Bratislava, Slovakia, 2025. P. NEE09-1–NEE09-6. (SCOPUS).

DOI: <https://doi.org/10.1109/NAP68437.2025.11216285>

URL: <https://www.scopus.com/pages/publications/105023659771>

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації (тези доповідей на конференціях та патент України на корисну модель):

11. Hrubciak A. B., **Moklyak M. G.**, Chelyadyn V. L. Structurally dependent electroconductivity properties of ultrafine composites α -FeOOH/ α -Fe₂O₃. *Nanotechnologies and Nanomaterials (NANO-2022) : 10th jubilee International Conference*, 25–27 August 2022, Lviv, Ukraine. P. 37.

URL: https://drive.google.com/file/d/1-tx2qcGzZI_LxqaHsVAfHTmc6MqzA8Hs/view?usp=drive_link

12. **Moklyak M. G.**, Hrubciak A. B., Moklyak V. V., Ostafyichuk B. K. Electrochemical Properties of Carbon Biocomposites. *Physics and Technology of Thin*

Films and Nanosystems : XIX International Freik Conference, 9–14 October 2023, Ivano-Frankivsk, Ukraine. P. 49.

URL: https://drive.google.com/file/d/1mJO21SzXGLGE7GgrCKv5ZNnIomT--0lc/view?usp=drive_link

13. **Moklyak M.**, Mazurenko J., Bandura K., Turovska L., Vytvytskyi A. The Role of Hydrogen Peroxide in the Photocatalytic Process of Dye Removal from an Aqueous Environment Under the influence of Visible Light. *XVI Rzeszowska Konferencja Młodych Fizyków*, 2 czerwca 2023, Rzeszow, Polska. P. 28.

URL: https://drive.google.com/file/d/18EQxEb2uD9zkVss5Y9sj5vIbjGpuJTQN/view?usp=drive_link

14. **Moklyak M.**, Mazurenko J., Kaykan L., Moklyak V. Effect of Post-Synthesis Annealing Temperature and Chelating Agent on Photocatalytic Properties of Nanosized Copper Ferrite. *Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2023) : International research and practice conference*, 16–19 August 2023, Bukovel, Ukraine. P. 62.

URL: https://drive.google.com/file/d/18BYtMVCtC2KZFetuRQ5IJ7okV4sPobEA/view?usp=drive_link

15. Ivanichok N. Y., Rachiy B. I., **Mokliak M. G.**, Lysiv T., Mokliak V. V. Obtaining activated carbon from biomass by thermal activation. *Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems : XX International Freik Conference*, 6–10 October 2025, Ivano-Frankivsk, Ukraine. P. 151.

URL: https://drive.google.com/file/d/18Lf05QCSDtSPz_XSILHB_dvd-iqpecFU/view?usp=drive_link

16. Mokliak V. V., Chelyadyn V. L., Halushchak M. O., **Mokliak M. G.** Structural stability of lithium battery cathodes based on core (α -Fe₂O₃) - shell (γ -FeOOH) nanocomposites. *Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems : XX International Freik Conference*, 6–10 October 2025, Ivano-Frankivsk, Ukraine. P. 157.

URL: https://drive.google.com/file/d/1b_s-VOGlQRwk26hOeLLC3Lusu-2kwsr1/view?usp=drive_link

17. **Mokliak M. G.**, Mazurenko J. S., Kaykan L. S., Mokliak V. V. Structural and optical studies of nanocomposites based on Nd-substituted copper ferrite. *Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems : XX International Freik Conference*, 6–10 October 2025, Ivano-Frankivsk, Ukraine. P. 213.

URL: https://drive.google.com/file/d/1oVirxCe7ed6tq1tld4cs3tO-8LpaIeY9/view?usp=drive_link

18. Dovbnia I., **Mokliak M.**, Moiseienko M., Ostapovych N. Design and evaluation of Nd-doped copper ferrite nanoparticles for biomedical hyperthermia. *Functional materials for technical and biomedical applications : International workshop for young scientists*, October 14-16, 2025, Lviv, Ukraine. P. 6.

URL: https://drive.google.com/file/d/1_z5qnGonKaEsom7YLYETH-PmGPMFl1H/view?usp=drive_link

19. **Mokliak M.**, Kaykan L., Mazurenko J., Mokliak V. The Effect of Neodymium Ions Substitution on the Structure and Elastic Properties of Copper Ferrites. *Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2025) : International research and practice conference*, 20–23 August 2025, Bukovel, Ukraine. P. 482.

URL: https://drive.google.com/file/d/1m3F2Fw6GZXaPOE8Tk7XPGjb6Gd5Gxj1U/view?usp=drive_link

20. Спосіб отримання фотокаталізатора на основі нанорозмірного мідного фериту для очищення води від органічних барвників : пат. 163225 Україна : B01J 23/70, C02F 103/14. № u 2025 06397 / Мазуренко Ю. С., Кайкан Л. С., Туровська Л. В., Мокляк В. В., **Мокляк М. Г.**, Мазуренко О. О. ; заявл. 19.12.2025 ; опубл. 03.06.2026, Бюл. № 22. 4 с.

URL: <https://sis.nipo.gov.ua/uk/search/detail/1927021/>