Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U001224

Державний реєстраційний номер: 0112U001279

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез, кристалічна структура, властивості нових сполук і фазові рівноваги в металічних системах

Початок етапу: 01.2012

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 032 2394122 , 032 2616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки

Код за ЄДРПОУ: 37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 820.886

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, кристалічна структура, властивості нових сполук і фазові рівноваги в металічних системах

Назва роботи англійською:

Synthesis, crystal structure, properties of new compounds and phase equilibria in metal systems

Реферат українською:

НДР є частиною систематичних багаторічних досліджень інтерметалічних сполук, які проводять на кафедрі неорганічної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка з метою розширення знань про цей клас речовин і синтезу нових сполук, що можуть стати основою майбутніх матеріалів із заданими властивостями. Об'єкт дослідження - три- та більше компонентні системи за участю рідкісноземельних металів, перехідних металів і p-елементів. Робота включала фізико-хімічне дослідження діаграм стану, визначення кристалічної структури, вимірювання окремих властивостей, таких як електричний опір, термоелектрорушійна сила, магнітна сприйнятливість та намагніченість, кристалохімічний аналіз і квантово-хімічні розрахунки. Методи дослідження - електродугова плавка, плавка у високочастотних печах, термічна обробка, мікроструктурний аналіз, енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія, диференціальний термічний аналіз, рентгенівська дифрактометрія (методи полі- та монокристалу). Вперше побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану 47 багатокомпонентних систем у повному або частковому концентраційному інтервалі. До розробленої концепції поліангуляції багатокомпонентних систем покладено термодинамічний, розмірний, електронний та кристалохімічний фактори. Визначено кристалічну структуру 212 сполук та багатокомпонентних фаз, серед яких 17 - представники нових структурних типів. Кристалохімічний аналіз показав, що структури сполук за концепцією топологічної інваріантності належать до одинадцяти класів. Найбільше представників має тригонально-призматичний клас структур (44,1 %). За концепцією фрагментарної будови структури розділено на п'ять серій, з яких серія двошарових структур має 54,9 % представників. Досліджено електричні, магнітні та деякі інші властивості для 60 синтезованих сполук і твердих розчинів. Більшість з них характеризується металічним типом провідності та є парамагнетиками Кюрі-Вейса. Проведено часткові заміни компонентів та додавання легуючих елементів для вивчення їхнього впливу на фізичні властивості. Для багатокомпонентних інтерметалідів систематизовано різні способи впорядкованого чи невпорядкованого заміщення атомів та виведено фактори, що визначають характер заміщення. Виведено алгоритм взаємозв'язку склад-структура-властивості для окремих груп інтерметалідів. Класифіковано дані по 114000 неорганічним фазам у відповідності до їхніх структурних типів. За тематикою наукового дослідження захищено 4 дисертаційні роботи на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук, опубліковано 2 монографії, 90 наукових статей, з них - 59 у журналах, що входять до наукометричних баз даних, та тези 105 доповідей на наукових конференціях, з них - тези 66 доповідей на конференціях, що входять до наукометричних баз даних, отримано 3 патенти України на корисну модель. Відомості про кристалічну структуру включені у міжнародні бази даних неорганічних сполук (PCD, США; ICSD, Німеччина; ICDD, США). Наукові результати також використані як приклади у курсах неорганічної хімії та кристалохімії для бакалаврів і магістрів Львівського університету. Перспективними серед досліджених сполук є інтерметалічні напівпровідники зі структурою типу фаз напів-Гейслера, які можуть бути використані як термоелектричні та термометричні матеріали. Для прикладу, сплав на основі Цирконію, Нікелю і Стануму, який характеризується вдвічі більшим значенням термоелектрорушійної сили у порівнянні з прототипом, рекомендований як матеріал для термопар і термоелементів; отримано два патенти України. Відкрито нову координаційну сполуку $Rh_2Se_9Br_6$, яка містить шестидентатний ліганд - корону Se_9. Показано потенційне застосування сполуки у каталітичних процесах; отримано патент України. Кристалохімічні закономірності та кристалографічні характеристики неорганічних сполук, синтезованих і вивчених при виконанні НДР, мають важливе значення для моделювання взаємодії хімічних елементів, і для раціоналізації розроблення

матеріалів із заданими властивостями, що підтверджено науковцями Інституту загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України та Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України.

Реферат англійською:

This research work is part of a long-term ongoing investigation of intermetallic compounds carried out at the Department of Inorganic Chemistry of the Ivan Franko National University of Lviv with the aim to increase our knowledge of this class of substances and synthesize new compounds that may form the basis of future materials with tailored properties. The research work focused on three- or more component systems containing rare-earth metals, transition metals, and p-block elements. The work included physical-chemical investigation of phase diagrams, determination of crystal structures, measurements of selected properties, such as electrical resistivity, thermoelectric power, magnetic susceptibility and magnetization, crystal-chemical analysis, and quantum-chemical calculations. The following experimental methods were commonly used: arc melting, induction melting, heat treatment, microstructure analysis, energy-dispersive X-ray spectroscopy, differential thermal analysis, X-ray powder diffraction, and X-ray single crystal diffraction. Full or partial isothermal sections of the phase diagrams of 47 multicomponent systems were constructed for the first time. A concept of polyangulation was developed for multicomponent systems, considering thermodynamic, size, electronic and crystal-chemical factors. The crystal structures of 212 compounds were determined, 17 of which were found to represent new structure types. The crystal-chemical analysis showed that, according to the concept of topological invariance, the structures belong to 11 different classes, of which the trigonal-prismatic class has the highest number of representatives (44.1 %), whereas according to the concept of modular structures, they can be subdivided into five series, of which the series of two-layer structures alone groups 54.9 %. Electrical, magnetic and other properties were measured for 60 of the compounds and solid solutions synthesized within the research work; most of them showed metallic type of conductivity and Curie-Weiss paramagnetism. Partial replacement of the constituents and addition of alloying elements was carried out to study the effect on the physical properties. Systematization of different kinds of ordered or disordered substitution of the atoms in multicomponent intermetallics was proposed and factors governing the substitution were derived. Algorithms describing the composition-structure-properties relationship were developed for particular groups of intermetallics. Data for 114000 inorganic phases were classified according to their structure types. Results of the scientific research carried out within the project have been published in four PhD theses, two monographs, and 90 scientific articles (59 in journals included in scientometric databases), and presented at national and international conferences (105 conference abstracts of which 66 included in scientometric databases); 3 patents of Ukraine were obtained. The crystallographic data have been included in international databases on inorganic compounds (PCD, USA; ICSD, Germany; ICDD, USA). The results are also used as examples in courses on inorganic chemistry and crystal chemistry for bachelor and master students at the University of Lviv. Among the compounds studied within the research work, certain intermetallic semiconductors with semi-Heusler type structure are promising substances for thermoelectric and thermometric applications. For example, the alloy containing zirconium, nickel and tin, which exhibits a Seebeck coefficient twice as large as that of the prototype, appears to be particularly interesting as a potential material for thermocouples and thermoelements; two UA patents were obtained. The new coordination compound $Rh_2Se_9Br_6$, which contains a sixdentate crown Se_9 ligand, was discovered; its potential use in catalytic processes was evidenced and the synthesis patented. The crystal-chemical peculiarities and crystallographic characteristics of the inorganic compounds synthesized and studied within the research work are of great importance for modeling the interaction of chemical elements and for rationalizing the design of materials with tailored properties, as underlined by representatives of the V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of NAS of Ukraine and I.M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NAS of Ukraine.

Індекс УДК: 548, 546:548.736.5

Коди тематичних рубрик: 31.15.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гладишевський Роман Євгенович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Нові неорганічні сполуки як основа матеріалів із необхідними хімічними та фізичними властивостями

Назва НТП англійською: New inorganic compounds as a basis for materials with required chemical and physical properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фазові рівноваги у 47 системах на основі рідкісноземельних, перехідних металів та p-елементів та кристалічна структура 212 нових сполук. Основи концепції поліангуляції багатокомпонентних систем, топологічної інваріантності та фрагментарної будови сполук, алгоритм взаємозв'язку склад-структура-властивості для окремих груп інтерметалідів. Кількісні характеристики електричних, магнітних та деяких інших властивостей для 60 сполук і твердих розчинів. Перспективними для практичного застосування є: інтерметалічні напівпровідники як термоелектричні матеріали; сполуки рідкісноземельних і перехідних металів - як магнітні матеріали; силіциди та германіди - як елементи магнітних рефрижераторів; сплави на основі алюмінію - як конструкційні матеріали.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Стан готовності розробки на прикладному рівні становить 20 %

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути Національної Академії Наук України

Перспективні ринки: Ринок товарів виробничого призначення

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

2 монографії, 5 навчальних посібників, 1 бібліографічний покажчик, 90 статей, з них - 59 у журналах, що входять до наукометричних баз даних; тези 105 доповідей на наукових конференціях, з них - тези 66 доповідей на конференціях, що входять до наукометричних баз даних; 3 патенти України на корисну модель, зокрема: 1. Villars P. Handbook of Inorganic Substances 2013 : [monograph] / P. Villars, K. Cenzual, R. Gladyshevskii. - Berlin: Walter de Gruyter, 2013. - 1653 p. 2. Villars P. Handbook of Inorganic Substances 2014 : [monograph] / P. Villars, K. Cenzual, R. Gladyshevskii. - Berlin: Walter de Gruyter, 2014. - 1717 p. 3. Пат. 74677 Україна, МПК (2012.01) C22C 30/00. Матеріал для термопар та термоелементів / Стадник Ю. В., Ромака В. В., Горинь А. М., Ромака Л. П. ; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. - № u 2012 04043 ; заявл. 02.04.2012 ; опубл. 12.11.2012, Бюл. № 21. 4. Пат. 78463 Україна, МПК (2013.01) C22C 30/00. Матеріал для термопар і термоелементів / Стадник Ю. В., Ромака В. В., Горинь А. М., Ромака Л. П. ; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. - № u 2012 08593 ; заявл. 11.07.2012 ; опубл. 25.03.2013, Бюл. № 6. 5. Пат. 85704 Україна, МПК (2013.01) C01G 55/00. Спосіб одержання селеноброміду родію Rh2Se9Br6 / Волков С. В., Гладишевський Р. Є., Янко О. Г., Харькова Л. Б., Демченко П. Ю., Баранець С. О., Машкова Е. М., Ніколенко А. С. ; заявники і власники Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського НАН України, Львівський національний університет імені Івана Франка. - № u 2013 07456 ; заявл. 12.06.2013 ; опубл. 25.11.2013, Бюл. № 22. 6. Romaka L. Structural, magnetic and electronic transport studies of RAgSn2 compounds (R = Y, Tb, Dy, Ho and Er) with Cu3Au-type / L. Romaka, V. V. Romaka, I. Lototska, A. Szytula, B. Kuzhel, A. Zarzycki, E. K. Hlil, D. Fruchart // Bull. Mater. Sci. - 2013. - Vol. 36, No. 7. - P. 1247-1253. 7. Voznyak I. The system Hf-Ga-Sn at 600 °C and the crystal structure of Hf5Ga1.24-0.52Sn1.76-2.48 / I. Voznyak, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. - 2011. - Vol. 4, No. 3/4. - P. 175-187. 8. Savysyuk I. The {Y,Pr}-Ag-Si systems: isothermal sections and crystal structures / I. Savysyuk, O. Shcherban, N. Semuso, R. Gladyshevskii, E. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. - 2012. - Vol. 5, No. 1/2. - P. 103-112. 9. Pukas S. The first aluminide with Ho4Ni10Ga21-type structure / S. Pukas, P. Demchenko, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. - 2013. - Vol. 6, No. 1/2. - P. 63-69. 10. Belan B. New ternary phases in the Lu-Ni-Si system / B. Belan, Ya. Tokaychuk, M. Manyako, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. - 2013. - Vol. 6, No. 3/4. - P. 209-213. 11. Belan B. Crystal structure and magnetic properties of PrNi9Si4 and NdNi9Si4 / B. Belan, M. Manyako, S. Pukas, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii, D. Kaczorowski // Chem. Met. Alloys. - 2014. - Vol. 7, No. 1/2. - P. 68-73. 12. Romaka V. Interaction of vanadium with iron and antimony at 870 K and 1070 K / V. Romaka, L. Romaka, Yu. Stadnyk, V. Gvozdetskyi, R. Gladyshevskii, N. Skryabina, N. Melnychenko, V. Hlukhyy, T. Fassler // Eur. J. Inorg. Chem. - 2012. - Vol. 2012. - P. 2588-2595. 13. Moroz M. V. Synthesis and electrical conductivity of crystalline and glassy alloys in the Ag3GeS3Br-GeS2 system / M. V. Moroz, P. Yu. Demchenko, O. G. Mykolaychuk, L. G. Akselrud, R. E. Gladyshevskii // Inorg. Mater. - 2013. - Vol. 49, No. 9. - P. 867-871. 14. Romaka V. V. Peculiarities of structural disorder in Zr- and Hf-containing Heusler and half-Heusler stannides / V. V. Romaka, P. Rogl, L. Romaka, Yu. Stadnyk, A. Grytsiv, O. Lakh, V. Krayovskii // Intermetallics. - 2013. - Vol. 35. - P. 45-52. 15. Sojka L. New compounds with Nd11Pd4In9 structure type in the systems RE-Pd-In (RE = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy) / L. Sojka, M. Demchyna, B. Belan, M. Manyako, Ya. Kalychak // Intermetallics. - 2014. - Vol. 49. - P. 14-17. 16. Voznyak I. Interstitial solid solution Hf5GaxSn3 (x = 0-1) / I. Voznyak, Ya. Tokaychuk, V. Hlukhyy, T. F. Fassler, R. Gladyshevskii // J. Alloys Compd. - 2012. - Vol. 512. - P. 246-251. 17. Konyk M. The V-Cu-Sb ternary system at 773 K: crystal, band structure, and physical properties / M. Konyk, L. Romaka, P. Demchenko, V. V. Romaka, Yu. Stadnyk, A. Horyn // J. Alloys Compd. - 2014. - Vol. 589. - P. 200-206. 18. Romaka L. Peculiarity of component interaction in Zr-Mn-{Sn,Sb} ternary systems / L. Romaka, A. Tkachuk, Yu. Stadnyk, V. V. Romaka, A. Horyn, R. Korzh // J. Alloys Compd. - 2014. - Vol. 611. - P. 401-409. 19. Shpotyuk Ya. Effect of Ga incorporation in the As30Se50Te20 glass / Ya. Shpotyuk, B. Bureau, C. Boussard-Pledel, V. Nazabal, R. Golovchak, P. Demchenko, I. Polovynko // J. Non-Cryst. Solids. - 2014. - Vol. 398-399. - P. 19-25. 20. Demchyna M. Phase diagrams of the Tb-Ag-In and Dy-Ag-In systems at 870 K / M. Demchyna, B. Belan, M. Manyako, A. Pietraszko, Ya. Kalychak // J. Solid State Chem. - 2012. - Vol. 192. - P. 360-365. 21. Matselko O. Ternary aluminides R0.67Ni2Al6 (R = Sc, Y, Gd-Lu) with partly disordered structures / O. Matselko, S. Pukas, Yu. Lutsyshyn, R. Gladyshevskii, D. Kaczorowski // J. Solid State Chem. - 2013. - Vol. 198. - P. 50-56. 22. Volkov S. V. Osmium thioselenochloride Os2S6Se2Cl8: synthesis, cluster isolation, and structure / S. V. Volkov, R. E.

Gladyshevskii, Yu. V. Mironov, P. Yu. Demchenko, O. G. Yanko, A. I. Smolentsev, Z. A. Fokina, L. B. Kharkova, S. A. Baranets // Russ. J. Coord. Chem. - 2012. - Vol. 38, No. 3. - P. 167-172. 23. Romaka V. A. Features of conduction mechanisms in n-HfNiSn semiconductor heavily doped with a Rh acceptor impurity / V. A. Romaka, P. Rogl, Yu. V. Stadnyk, V. V. Romaka, E. K. Hlil, V. Ya. Krajovskii, A. M. Horyn // Semicond. - 2013. - Vol. 47. - P. 1145-1152. 24. Kaczorowski D. Magnetic and electrical properties of EuPdGe3 / D. Kaczorowski, B. Belan, R. Gladyshevskii // Solid State Commun. - 2012. - Vol. 152. - P. 839-841. 25. Tokaychuk I. Crystal structure of Hf2GaSb3 / I. Tokaychuk, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii // Solid State Phenom. - 2013. - Vol. 194. - P. 1-4. 26. Зелінський А. Синтез та кристалічна структура сполук UMn1,43Ga0,57 та U2Fe3Ga / А. Зелінський, А. Федорчук, О. Зелінська // Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. - 2013. - Вип. 54. - С. 92-97. 27. Gladyshevskii R. Different forms of substitution in R-T-M systems / R. Gladyshevskii, B. Belan, P. Demchenko, V. Fedyna, Yu. Lutsyshyn // Book. Abs. 19 Int. Conf. Solid Compd. Transition Elem. (June 21-26, 2014) - Genoa, Italy, 2014. - P. 98.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович

Перелік осіб-виконавців

Белан Богдана Дмитрівна

Горинь Андрій Маркіянович

Демченко Павло Юрійович

Зелінський Анатолій Вікторович

Маняко Микола Богданович

Пукас Світлана Ярославівна

Ромака Любов Петрівна

Семусьо Наталія Зеновіївна

Стадник Юрій Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

