Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U001225

Державний реєстраційний номер: 0112U001280

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Хімічний зв'язок в інтерметалідах і споріднених сполуках: електронна густина з рентгенівської дифракції

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): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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.): 372.236

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Хімічний зв'язок в інтерметалідах і споріднених сполуках: електронна густина з рентгенівської дифракції

Назва роботи англійською:

Chemical bonding in intermetallics and related compounds: electron density from X-ray diffraction

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - інтерметалічні сполуки та споріднені до них інші класи неорганічних сполук, які проявляють унікальні хімічні та фізичні властивості. В першу чергу -сполуки металічних і напівметалічних елементів з модульованими та композитними структурами. Предмет дослідження - визначення кристалічної структури сполук постійного або змінного складу на основі прецизійного дифракційного експерименту з уточненням координат, ангармонічних і мультипольних параметрів атомів та синтез експериментальної електронної густини з подальшою інтерпретацією хімічного зв'язку та фізичних властивостей речовин. Мета проекту - формування нової мови опису внутрішньої будови неорганічних речовин в твердому стані, що дозволяє представити не тільки якісні характеристики, але й кількісні параметри хімічного зв'язку. Дослідження спрямовані на встановлення загальної системи та алгоритмів взаємозв'язку між структурними особливостями та характером хімічного зв'язку в інтерметалічних та інших неорганічних сполуках. Методи синтезу та дослідження - плавка в електродугових, високочастотних або муфельних печах, зміннострумний електрохімічний синтез, відпал зразків у муфельних печах, рентгенофазовий аналіз, рентгеноструктурний аналіз методами монокристалу та порошку з використанням лабораторного обладнання та джерел синхротронного випромінювання, нейтронна дифракція, рентгеноспектральний аналіз, диференціальний термічний та термогравіметричний аналізи, раманівська та інфрачервона спектроскопія, вимірювання електроопору стандартним чотириконтактним методом, питомої теплоємності, магнітної сприйнятливості, намагніченості, твердості за Вікерсом, квантово-хімічні розрахунки методом теорії функціоналу густини. На основі масивів прецизійних дифракційних даних встановлено реальну кристалічну структуру та проаналізовано характер хімічного зв'язку для 114 неорганічних сполук. Для модульованих структур сполук LiZn4-x, Eu2Rh1-xGa5, EuPt2Ga2, (Tb0,70Zr0,30)(Al0,17Si0,83) та композитної структури сполуки Dy0,64{Dy5[Fe2C9]} одержано кількісні характеристики модуляції в багатовимірному просторі: вектори модуляції, амплітуди модуляції координат атомів, амплітуди модуляції заповнення положень. Створено оригінальну програму уточнення мультипольних параметрів за моделлю Хансена-Коппенса для розрахунку тривимірного розподілу електронної густини з рентгенівських дифракційних даних методом мінімізації різницевої функції експериментальних структурних факторів. Уточнено параметри мультипольної моделі та отримано перерізи деформаційної та валентної електронної густини. Створено оригінальну комп'ютерну програму для встановлення та аналізу деталізованої картини хімічного зв'язку. Для виявлення особливостей розподілу електронної густини створено програму розрахунку лапласіана електронної густини за допомогою тривимірного швидкого перетворення Фур'є на рівномірній сітці реального простору елементарної комірки. Визначено кількісні характеристики хімічного зв'язку з синтезів електронної густини для низки сполук. Розроблено основи концепції хімічного зв'язку в інтерметалідах на основі експериментальної електронної густини з рентгенівської дифракції. Проаналізовано вплив природи компонентів на кристалічну структуру, хімічний зв'язок і властивості синтезованих сполук. Систематизовано 700 структурних типів неорганічних сполук із тетрагональною сингонією за кристалографічними та кристалохімічними характеристиками. За тематикою наукового дослідження підготовлено та захищено 8 магістерських, 2 дипломні та 10 курсових робіт, 2 кандидатські дисертації, опубліковано 2 монографії, 1 навчальний посібник, 63 статті (з них - 49 у журналах, що входять до наукометричних баз даних), тези 60 доповідей на наукових конференціях (з них - тези 44 доповідей на міжнародних конференціях), отримано 1 патент України на корисну модель. Наукові результати використані при читанні загальних і спеціальних

курсів для підготовки бакалаврів, спеціалістів і магістрів у галузі неорганічної хімії та кристалохімії. Одержані під час виконання НДР результати використані науковцями Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України і Фізико-механічного інституту ім. Г.В. Карпенка НАН України.

Реферат англійською:

Object of investigation - intermetallic compounds and related classes of inorganic compounds with unique chemical and physical properties, in particular compounds of metal and semimetal elements with modulated and composite structures. Subject of investigation - determination of the crystal structures of compounds with constant or variable compositions based on precise diffraction experiments, including refinements of the coordinates, inharmonic and multipole parameters of the atoms, and synthesis of the experimental electron density; interpretation of the chemical bonding and physical properties. Purpose of the project - a new approach to the description of the atomic structure of inorganic substances in the solid state, which allows representing not only qualitative characteristics, but also quantitative parameters of chemical bonds. The investigation was focused on the establishment of general algorithms expressing the correlation between structural features and the character of chemical bonding in intermetallic and other inorganic compounds. Methods of synthesis and investigation - melting in arc, high-frequency or muffle furnaces, a.c. electrochemical synthesis, annealing in muffle furnaces, single-crystal and powder X-ray diffraction using conventional laboratory equipment or a synchrotron source, neutron diffraction, energy-dispersive X-ray analysis, differential thermal analysis, thermal gravimetry, Raman spectroscopy, infrared spectroscopy, measurements of the electrical resistivity by the standard four-contact method, of heat capacity, magnetic susceptibility, magnetization, Vicker's hardness, quantum-mechanical calculations based on the density functional theory. The crystal structures of 114 inorganic compounds were determined from high-precision diffraction data, and the chemical bonds analyzed. For the modulated structures of LiZn4-x, Eu2Rh1-xGa5, EuPt2Ga2, (Tb0.70Zr0.30)(Al0.17Si0.83), and for the composite structure of Dy0.64{Dy5[Fe2C9]}, quantitative characteristics of the modulation in multi-dimensional space were obtained: modulation vectors, modulation amplitudes of the atomic positional coordinates and site occupancies. Original software was created for the refinement of multipole parameters, using the Hansen-Coppens model for the calculation of the 3D distribution of electron density from X-ray diffraction data and the method of minimization of difference function of experimental structure factors. Parameters of multipole models were refined and sections of deformation and valence electron density were obtained. New software was created for the determination and analysis of detailed patterns of chemical bonding. In order to find the peculiarities of the electron density distribution, a program of laplacian calculations, using 3D fast Fourier transform of the real space of the unit cell on a uniform grid, was written. Quantitative characteristics of the chemical bonding, based on the experimental electron density obtained from X-ray diffraction, were determined for a certain number of compounds, making it possible to draw some conclusions on the principles of chemical bonding in intermetallic compounds. The influence of the nature of components on the crystal structure, chemical bonding and properties of compounds synthesized within the project was analyzed. 700 structure types of inorganic compounds with tetragonal symmetry were systematized according to their crystallographic and crystal-chemical characteristics. Results of the scientific research carried out within the project are included in eight master works, two diploma works, ten bachelor works, two PhD theses, and one tutorial. They have been published in 63 scientific articles (49 in journals included in scientometric databases) and two monographs, and presented at national and international conferences (60 conference abstracts of which 44 at international conferences); one patent of Ukraine was obtained. 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. Some of the results obtained during the project are currently used at the I.M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science (NAS) and G.V. Karpenko Physico-Mechanical Institute (NAS).

Індекс УДК: 548, 546:548.3

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: Кількісні характеристики хімічного зв'язку в інтерметалідах і споріднених сполуках.

Назва НТП англійською: Quantitative characteristics of chemical bonding in intermetallics and related compounds.

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: Реальна кристалічна структура 114 нових неорганічних сполук, кількісні характеристики модуляції в багатовимірному просторі. Оригінальні програми уточнення мультипольних параметрів за моделлю Хансена-Коппенса для розрахунку тривимірного розподілу електронної густини з рентгенівських дифракційних даних, встановлення та аналізу деталізованої картини хімічного зв'язку та розрахунку лапласіана електронної густини. Кількісні характеристики хімічного зв'язку з синтезів електронної густини. Основи концепції хімічного зв'язку в інтерметалідах на основі експериментальної електронної густини з рентгенівської дифракції. Потенційною основою конструкційних матеріалів можуть слугувати синтезовані в рамках проекту алюмогерманіди R2Al3Ge3, надпровідних матеріалів - модифіковані Bi-2212 і Bi-2223, термоелектричних матеріалів - тверді розчини на основі сполук зі структурою типу MgAgAs, воденьсорбційних матеріалів - інтерметаліди R2T2Al.

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 програмного забезпечення

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, 1 навчальний посібник, 63 статті, з них - 49 у журналах, що входять до наукометричних баз; тези 60 доповідей на наукових конференціях, з них - тези 44 доповідей на конференціях, що входять до наукометричних баз; 1 патент України на корисну модель, зокрема: 1. Daams J. Crystal Structures of Inorganic Compounds. Landolt-B?rnstein III/43. (A: Structure Types, Part 11: Space Groups (135) P42/mbc - (123) P4/mmm) / J. Daams, R. Gladyshevskii, O. Shcherban, V. Dubenskyy, V. Kuprysyuk, I. Savysyuk, R. Zaremba; Eds. P. Villars, K. Cenzual. - Berlin: Springer-Verlag, 2012. - 511 p. 2. Wind J. The systems tantalum(niobium)-cobalt-boron / J. Wind, O. Romaniv, G. Sch?llhammer, J. Bursik, H. Michor, G. Giester, P. Rogl // J. Phase Equilib. Diffus. - 2014. - Vol. 35. - P. 43-85. 3. Павлюк О. В. Вибрані розділи кристалохімії неорганічних сполук. Частина 1. Навчальний посібник / О. В. Павлюк, М. Г. Миськів. - Львів: ТЗОВ "Діпіай", 2012. ? 124 с. 4. Патент України на корисну модель № 89420, МПК (2014.01) C08G 73/00 C08L 63/00 H01B 1/12 (2006.01). Магнітний, струмопровідний, композитний матеріал на основі поліаніліну / М. М. Яцишин, В. М. Струк, П. Ю. Демченко, Ю. В. Стадник. - опубл. 25.04.2014, Бюл. № 8. Заявник і власник - Львівський національний університет імені Івана Франка. 5. Ardan B. First N-allyl-thiadiazole copper(I) ?-complexes: synthesis and structural peculiarities of [Cu(L)CF3SO3] and [Cu2(L)2(H2O)2](SiF6)·2.5H2O compounds (L = 2-(allyl)-amino-5-methyl-1,3,4-thiadiazole) / B. Ardan, Yu. Slyvka, E. Goreshnik, M. Mys'kiv // Acta. Chim. Slov. 2013. Vol. 60. P. 484 490. 6. Pavlyuk V. LiZn4-x (x = 0.825) as a (3+1)-dimensional modulated derivative of hexagonal close packing / V. Pavlyuk, I. Chumak, L. Akselrud, S. Lidin, H. Ehrenberg // Acta Crystallogr. B. - 2014. - Vol. 70. - P. 212-217. 7. Trots D. M. The determination of hydrogen positions in superhydrous phase B / D. M. Trots, A. Kurnosov, M. A. Geeth M. Manthilake, S. V. Ovsyannikov, L. G. Akselrud, T. Hansen, J. R. Smyth, D. J. Frost // Am. Mineralog. - 2013. - Vol. 98. - P. 1688-1692. 8. Slyvka Yu. Copper(I) ?-complexes with allyl derivatives of heterocyclic compounds: structural survey of their crystal engineering / Yu. Slyvka, E. Goreshnik, A. Pavlyuk, M. Mys'kiv // Centr. Eur. J. Chem. 2013. Vol. 11. P. 1875 1901. 9. Semenyshyn D. Regularities in the crystal structures of heterocationic octacyanometallates(IV) molybdenum and tungsten / D. Semenyshyn, I. Typilo, R. Gladyshevskii, V. Starchevskii // Chem. Chem. Techn. - 2013.- Vol. 7, No. 4. - P. 369-374. 10. Lutsyshyn Yu. Rare-earth cobalt aluminides with Y2Co3Ga9-type structure / Yu. Lutsyshyn, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. - 2011. - Vol. 4, No. 3/4. - P. 243-250. 11. Slivinskyy T. The quasi-binary system SmGa2-SmAl2 at 600?C / T. Slivinskyy, Ya. Tokaychuk, K. Cenzual, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys - 2011. - Vol. 4, No. 3/4. - P. 251-256. 12. Fedyna V. Crystal structure of the ternary compound Dy3Ga2.54Sn2.46 / V. Fedyna, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii / Chem. Met. Alloys. - 2012. - Vol. 5, No. 3/4. - P. 161-165. 13. Muts N. Crystal structure of the quaternary phase Pr(Ni,Al,Ge)2-x at the composition Pr(Ni0.23Al0.03Ge0.74)1.85 / Muts N., Shcherban O., Gladyshevskii R. / Chem. Met. Alloys. - 2012. - Vol. 5, No. 3/4. - P. 166-172. 14. Havela L. Structure and magnetism of R2T2X compounds and their hydrides; comparison of lanthanides and actinides / L. Havela, S. Ma?kov?, P. Svoboda, K. Miliyanchuk, A. Kolomiets, A. V. Andreev // Chem. Met. Alloys. - 2013. - Vol. 6, No. 3/4. - P. 170-176. 15. Tokaychuk Ya. Crystal structure of Dy2Ga1.8Ge5.2 / Ya. Tokaychuk, T. Delenko, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. - 2013. - Vol. 6, No. 3/4. - P. 220-224. 16. Semenyshyn D. Investigation of the crystal structures of new cyano-bridged compounds with KLaMo(CN)8·9H2O structure type / D. Semenyshyn, R. Gladyshevskii, H. Stoeckli-Evans, I. Typilo, O. Sereda // Chem. Met. Alloys. - 2014. - Vol. 7, No. 1/2. - P. 112-118. 17. Gumeniuk R. Ca3Pt(4+x)Ge(13-y) and Yb3Pt4Ge13: new derivatives of the Pr3Rh4Sn13 structure type / R. Gumeniuk, L. Akselrud, K. Kvashnina, W. Schnelle, A. Tsirlin, C. Curfs, H. Rosner, M. Sch?neich, U. Burkhardt, U. Schwarz, Yu. Grin, A. Leithe-Jasper // Dalton Trans. 2012. Vol. 41. P. 6299-6309. 18. Kasian O. I. Electrochemical properties of thermally treated platinized Ebonex® with low content of Pt / O. I. Kasian, T. V. Luk'yanenko, P. Demchenko, R. E. Gladyshevskii, R. Amadelli, A. V. Velichenko // Electrochim. Acta. - 2013. - Vol. 109. - P. 630-637. 19. Zheng Q. TM7TM?6B8 (TM = Ta, Nb; TM? = Ru, Rh, Ir): new compounds with [B6] ring polyanions / Q. Zheng, M. Kohout, R. Gumeniuk, N. Abramchuk, H. Borrmann, Yu. Prots, U. Burkhardt, W. Schnelle, L. Akselrud, H. Gu, A. Leithe-Jasper, Yu. Grin // Inorg. Chem. - 2012. - Vol. 51. - P. 7472-7483. 20. Berdonosov P. Cs7Nd11(SeO3)12Cl16 - the first non-centrosymmetric structure among alkaline metal lanthanide selenite halides / P. Berdonosov, L. Akselrud, Yu. Prots, A. Abakumov, P. Smet, D. Poelman, G. Van Tendeloo, V.

Dolgikh // Inorg. Chem. - 2013. - Vol. 52. - P. 3611-3619. 21. Tokaychuk Ya. TbGa2.64(4)Sn0.36(4) - a new close-packed structure type / Ya. Tokaychuk, A. Fedorchuk // J. Alloys Compd. - 2012. - Vol. 541. - P. 23-28. 22. Akselrud L. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) / L. Akselrud, Yu. Grin // J. Appl. Crystallogr. - 2014. - Vol. 47. - P. 803-805. 23. Savankova T. M. Synthesis, crystal structure refinement, and electrical conductivity of Pb(8-x)Na2Smx(VO4)6O(x/2) / T. M. Savankova, L. G. Akselrud, L. I. Ardanova, A. V. Ignatov, E. I. Get'man, R. E. Gladyshevskii, S. N. Loboda // J. Chem. - 2014. - ID 263548. -7 p. doi: 10.1155/2014/263548. 24. Goreshnik E. A. Anion-dependent complexation of 2-amino-benzothiazole and 2-imino-3-allyl-benzothiazole with Cu+: synthesis and characterization of [Cu(?2-C10H10SN2)(C7H6SN2)NO3] and [Cu(C7H6SN2)2]ClO4 / E. A. Goreshnik, M. G. Mys'kiv // J. Coord. Chem. - 2012. - Vol. 65, No. 15. - P. 2743-2750. 25. Ma?kov? S. Onset of magnetic order in U2(Ni1?xFex)2Sn-H / S. Ma?kov?, L. Havela, A. Kolomiets, K. Miliyanchuk, A. V. Andreev, H. Nakotte, J. Peterson, Y. Skourski, S. Yasin, S. Zherlitsyn, J. Wosnitza // J. Korean Phys. Soc. - 2013. - Vol. 62. - P. 1542-1546. 26. Davaasuren B. Dy0.64{Dy5[Fe2C9]}: a complex carbide with a composite structure / B. Davaasuren, E. Dashjav, R. Kniep, G. Kreiner, W. Schnelle, L. Akselrud, S. van Smaalen, A. W?lfel // J. Solid State Chem. - 2012. - Vol. 190. - P. 73-79. 27. Yarema M. R4Ir13Ge9 (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm) and RIr3Ge2 (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm): crystal structures with nets of Ir atoms / M. Yarema, O. Zaremba, R. Gladyshevskii, V. Hlukhyy, T. F. F?ssler // J. Solid State Chem. - 2012. - Vol. 196. - P. 72-78. 28. Chepyga L. Graphene-like autointercalated niobium diselenide nanoparticles: new possibility of 2D nanomaterials design / L. Chepyga, L. Kulikov, V. Talash, L. Akselrud // In: Nanomaterials Imaging Techniques, Surface Studies, and Applications. Springer Proceedings in Physics. - Vol. 146. - 2013. - P. 73-82. 29. Gumeniuk R. Y3Pt4Ge13: A superconductor with a noncentrosymmetric crystal structure / R. Gumeniuk, M. Nicklas, L. Akselrud, W. Schnelle, U. Schwarz, A. A. Tsirlin, A. Leithe-Jasper, Yu. Grin // Phys. Rev. B. - 2013. - Vol. 87. - P. 224502 (9 p.). 30. Romaka V. A. Features of the band structure and conduction mechanisms in the n-HfNiSn semiconductor yeavily doped with Ru / V. A. Romaka, P. Rogl, V. V. Romaka, Yu. V. Stadnyk, R. O. Korzh, V. Ya. Krayovskyy, and A. M. Horyn // Semicond. - 2014. - Vol. 48, No. 12. - P. 1545-1551. 31. Zaremba O. The size factor as criterion for the formation of M14Cu24O41 phases / O. Zaremba, R. Gladyshevskii // Solid State Phenom. - 2013. - Vol. 200. - P. 79-85. 32. Terlan B. Experimental QTAIM analysis of the electron density in TiB2 / B. Terlan, L. Akselrud, A. I. Baranov, H. Borrmann, Yu. Grin // Z. Anorg. Allg. Chem. - 2013.- Vol. 639. - P. 2065-2070. 33. Gladyshevskii R. Tb2Al3Ge3, a new partly disordered structure type with Al3 triangles / R. Gladyshevskii, Yu. Lutsyshyn, R. Cerny // Z. Anorg. Allg. Chem. - 2014. - Vol. 640. - P. 2512-2519.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович

Перелік осіб-виконавців

Аксельруд Лев Григорович

Горинь Андрій Маркіянович

Заремба Оксана Іванівна

Зелінський Анатолій Вікторович

Луцишин Юрій Ярославович

Сливка Юрій Іванович

Стадник Юрій Володимирович

Токайчук Ярослав Олексійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

