Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U002321

Державний реєстраційний номер: 0115U003257

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез і кристалохімія нових інтерметалічних сполук з функціональними властивостями

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2017

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) 255-41-00 , (032) 261-69-03

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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.): 2790.95

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез і кристалохімія нових інтерметалічних сполук з функціональними властивостями

Назва роботи англійською:

Synthesis and crystal chemistry of new intermetallic compounds with functional properties

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - багатокомпонентні системи, що містять рідкісноземельні (лужні чи лужноземельні) метали, перехідні d-метали і p-елементи III-V груп періодичної системи, та індивідуальні хімічні фази, що в них утворюються. Предмет дослідження - фазові рівноваги в багатокомпонентних системах, діаграми стану, умови утворення фаз, концентраційні та температурні області їхнього існування, параметри синтезу, кристалічна та електронна структури, хімічний зв'язок, каталітичні, воденьсорбційні, електрохімічні, електротранспортні, термоелектричні та магнітні властивості, а також кристалохімічні особливості нових інтерметалічних сполук, закономірності, які пов'язують їхній склад, структуру та властивості. Мета проекту - одержання нових інтерметалічних сполук рідкісноземельних (лужних чи лужноземельних) металів, перехідних d-металів і p-елементів III V груп періодичної системи, що стануть основою матеріалів із комплексом функціональних властивостей. Проект передбачає фізико-хімічне дослідження діаграм стану багатокомпонентних систем, визначення кристалічної структури сполук, що в них утворюються, а також вивчення комплексу їхніх хімічних і фізичних властивостей. Методи дослідження - синтез сплавів в електродугових, високочастотних і муфельних печах (пряма взаємодія компонентів, синтез через лігатури, багатостадійний твердофазний синтез з утворенням проміжних фаз, ампульний синтез), термічна обробка зразків у муфельних і трубчатих печах, диференціальна скануюча калориметрія, диференціальний термічний аналіз, рентгенофазовий аналіз, мікроструктурний аналіз, рентгеноспектральний аналіз, рентгеноструктурний аналіз (методи полі- та монокристалу), розрахунок електронної структури, дослідження каталітичної здатності сплавів як конверторів, визначення хроновольтамперометричних характеристик електродних матеріалів, потенціометричний двозондовий метод для вимірювання електроопору та коефіцієнту Зеебека, відносний метод Фарадея для дослідження магнітної сприйнятливості, екстракційний метод для вимірювання намагніченості. Методами рентгенівського фазового та мікроструктурного аналізів побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану 88 потрійних системи в повному або частковому концентраційному інтервалі, а також 24 квазіподвійних систем. Рентгенівськими методами монокристалу та порошку визначено кристалічну структуру 397 інтерметалідів, 11 інших неорганічних сполук, 44 комплексних сполук і 28 багатокомпонентних твердих розчинів, а також визначено електронну структуру та кількісні характеристики хімічного зв'язку для 28 неорганічних сполук. Відкрито низку нових структурних типів, створено карти локалізації інтерметалідів за фундаментальними параметрами. Систематизовано кристалографічні та кристалохімічні параметри, виведено алгоритм взаємозв'язку склад-структура-властивості для окремих класів неорганічних сполук. Для синтезованих сполук досліджено каталітичні, воденьсорбційні, електрохімічні, електротранспортні, термоелектричні та магнітні властивості. Термоелектричні і термометричні матеріали - тверді розчини на основі фаз напів-Гейслера TiNiSn1-xGax, V1-xTixFeSb, VTi1-xFexSb і скутерудитів TixCo4Sb12, VxCo4Sb12, а також способи синтезу координаційних сполук купруму захищено патентами України. За тематикою наукового дослідження підготовлено та захищено 19 магістерських, 29 дипломних та 84 курсові (7 - магістри II року навчання, 18 - магістри I року навчання і 59 - бакалаври) робіт, 2 докторські та 4 кандидатські дисертації, опубліковано 3 монографії у закордонних видавництвах (Walter de Gruyter, Elsevier), 2 монографії у вітчизняних видавництвах, 3 навчальні посібники, 184 статті (з них: 76 у виданнях, що індексуються базами даних Scopus та/або WoS і 108 у вітчизняних фахових виданнях), тези 217 доповідей на наукових конференціях (з них: тези 28 доповідей на конференціях, проведених за кордоном, і тези 189 доповідей на конференціях, проведених в

Україні), отримано 8 патентів України на корисні моделі. Наукові результати використані під час читання 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 загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України.

Реферат англійською:

Object of the investigation: multicomponent systems containing rare-earth (alkaline or alkaline-earth) metals, transition d-metals and p-elements of groups III-V of the periodic system, and the compounds formed in these systems. Subject of the investigation: phase equilibria in multicomponent systems, phase diagrams, conditions of formation of phases, composition and temperature ranges of their existence, optimization of syntheses, crystal structures, electronic structures, chemical bonding, hydrogen sorption, catalytic, electrochemical, electric transport, thermoelectric and magnetic properties, as well as crystal chemical peculiarities of new intermetallic compounds, relations between their composition, structure and properties. Aim of the project: prepare new intermetallic compounds that will become the basis of materials with functional properties. The project includes physical chemical investigation of phase diagrams of multicomponent systems, determination of the crystal structures of the compounds formed in them, and studies of chemical and physical properties of selected compounds. Methods used for the project: arc-melting, synthesis in high-frequency and muffle furnaces (direct interaction of the components, synthesis via ligatures, multistep solid-state synthesis, ampoule synthesis), thermal treatment in muffle and tube furnaces, differential scanning calorimetry, differential thermal analysis, X-ray powder and single-crystal diffraction for phase analysis and crystal structure determination, microstructure analysis, energy dispersive X-ray spectroscopy, electronic structure calculations, tests for perspective catalytic converters, chrono voltamperometry for the characterization of electrode materials, application of the potentiometric two-probe method for electrical resistance and Seebeck coefficient measurements, the Faraday method for magnetic susceptibility studies, and the extraction method for magnetization measurements. X-ray powder diffraction and microstructure analysis were used to construct isothermal sections of the phase diagrams of 88 ternary systems in the whole or part of the concentration range, including 24 quasibinary systems. The crystal structures of 397 intermetallic compounds, 11 other inorganic compounds, 44 coordination complexes and 28 multicomponent solid solutions were determined by X-ray single-crystal and powder diffraction, and the electronic structure and quantitative parameters for the chemical bonding were determined for 28 inorganic compounds. Several new structure types were discovered, and maps of the formation of intermetallics as a function of fundamental parameters were constructed. Crystallographic and crystal chemical parameters were systemized, and algorithms expressing the relationship between composition, structure and property were derived for particular classes of inorganic compounds. Catalytic properties, hydrogen sorption, electrochemical, electric transport, thermoelectric and magnetic properties were studied for relevant compounds. Certain thermoelectric and thermometric materials (solid solutions based on the half-Heusler phases TiNiSn1-xGax, V1-xTixFeSb, and VTi1-xFexSb, or the skutterudites TixCo4Sb12 and VxCo4Sb12), as well as methods of synthesis of coordination compounds of copper developed within the project, are protected by Ukrainian patents. Within the frame of the project, 19 master degrees, 29 diplomas, 84 undergraduate dissertations (7 2nd year master students, 18 1st year master students, 59 bachelors), 2 doctor and 4 candidate theses were defended; 3 monographs were published by international publishing houses (Walter de Gruyter, Elsevier); 2 monographs were published by Ukrainian publishing houses; 3 textbooks, 184 articles (76 in journals indexed by Scopus and/or Web of Science, and 108 in Ukrainian journals), 217 conference abstracts (28 at conferences taking place abroad and 189 at conferences held in Ukraine) were published; and 8 Ukrainian Patents for Utility Model were obtained. The scientific results were used in the general and advanced courses for bachelors, specialists and master students in the fields of inorganic chemistry and crystal chemistry. Some of the results were used by scientists from the V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine and the I.M. Frantsevych Institute for Problems in Materials Science of the NAS of Ukraine.

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: Нові інтерметаліди із заданими властивостями

Назва НТП англійською: New intermetallics with defined properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Фазові рівноваги у 88 потрійних систем за участю рідкісноземельних (лужних чи лужноземельних) металів, перехідних d-металів і p-елементів III-V груп періодичної системи в повному або частковому концентраційному інтервалі, а також 24 квазіподвійних систем. Кристалічна структура 397 інтерметалідів, 11 інших неорганічних сполук, 44 комплексних сполук і 28 багатокомпонентних твердих розчинів. Електронна структура та кількісні характеристики хімічного зв'язку для 28 неорганічних сполук.. Вдосконалені концепції поліангуляції багатокомпонентних систем, топологічної інваріантності та фрагментарної будови сполук, алгоритм взаємозв'язку склад-структура-властивості для окремих груп інтерметалідів. Кількісні характеристики каталітичних, воденьсорбційних, електрохімічних, електротранспортних, термоелектричних та магнітних властивостей синтезованих сполук, а також їхня кореляція з параметрами хімічного зв'язку. Сплави систем Pd-Ga-{Sn,Sb} є новими матеріалами для високоселективних і стабільних каталізаторів промислов

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

3 монографії у закордонних видавництвах, 2 монографії у вітчизняних видавництвах, 3 навчальні посібники, 184 статті (з них: 76 у виданнях, що індексуються базами даних Scopus та/або WoS і 108 у вітчизняних фахових виданнях), тези 217 доповідей на наукових конференціях (з них: тези 28 доповідей на конференціях, проведених за

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович

Перелік осіб-виконавців

Аксельруд Лев Гершович

Ардан Богдан Романович

Бабіжецький Володимир Станіславович

Белан Богдана Дмитрівна

Гвоздецький Володимир Ярославович

Горинь Андрій Маркіянович

Дзевенко Марія Віталіївна

Дмитрів Григорій Степанович

Жак Ольга Володимирівна

Завалій Ігор Юліанович

Заремба Василь Іванович

Зелінська Оксана Ярославівна

Каличак Ярослав Михайлович

Коник Марія Богданівна

Котур Богдан Ярославович

Левицький Володимир Олексійович

Лук'янов Михайло Юрійович

Маняко Микола Богданович

Мацелко Оксана Василівна

Мельниченко Наталія Олексіївна

Миськів Мар'ян Григорович

Михалічко Віталія Михайлівна

Ощаповський Ігор Валентинович

Павлюк Володимир Васильович

Павлюк Олексій Вікторович

Пукас Світлана Ярославівна

Ромака Віталій Володимирович

Ромака Любов Петрівна

Семусьо Наталія Зеновіївна

Сливка Юрій Іванович

Стадник Юрій Володимирович

Стельмахович Богдан Мирославович

Стецьків Андрій Остапович

Стецiв Юлія Антонівна

Тарасюк Іван Іванович

Тиванчук Юрій Богданович

Токайчук Ярослав Олексійович

Шпирка Зіновія Михайлівна

Штендер Віталій Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

