Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U001236

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-03-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Ректора Львівського національного університету імені Івана Франка від 04.04.2024 р. № 466

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Данкевич Роман Васильович
2. Roman V. Dankevych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0009-1290-1133

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Хімія

Дата захисту: 19-03-2024

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Товариство з обмеженою відповідальністю «МОНАРХ»

Код за ЄДРПОУ: 30542557

Місцезнаходження: Вулиця Незалежності, будинок 99, смт. Новий Яричів, Кам'янка-Бузький р-н., 80465, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.051.163_ID 4500

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15.17, 31.15.25, 31.15.30

Тема дисертації:

1. Системи Gd–{Si,Ge}–{Sb,Sb}: фазові рівноваги та кристалічна структура сполук.

2. Systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}: phase equilibria and crystal structures of the compounds.

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена експериментальному дослідженню хімічної взаємодії компонентів у потрійних системах Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}, встановленню фазових рівноваг та побудові ізотермічних перерізів діаграм стану при 600°C, синтезу та визначенню кристалічної структури сполук, які в них утворюються, і виведенню їхніх кристалохімічних закономірностей. Здійснено систематизацію та аналіз літературних відомостей про компоненти досліджуваних систем, діаграми стану подвійних систем Gd–{Si,Ge,Sn,Sb} і {Si,Ge}–{Sn,Sb} та потрійних систем РЗМ–Si–Ge і РЗМ–{Si,Ge}–{Sn,Sb,Bi}, а також про кристалічні структури сполук, що в них утворюються. Зроблено відповідні висновки і спрогнозовано можливий характер взаємодії компонентів у системах Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}. Електродуговим сплавлянням і подальшим гомогенізуючим відпалом при 600°C синтезовано 32 двокомпонентні та 167 трикомпонентних сплавів потрійних систем Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}, а також три сплави у спорідненій потрійній системі La–Ge–Bi. Як вихідні компоненти використали компактні прості речовини. Фазовий склад сплавів та кристалічні структури індивідуальних фаз визначено

рентгенівським фазовим та структурним аналізами (метод порошку) за масивами дифракційних даних, отриманих на дифрактометрах STOE Stadi P (проміння Cu Kп1) і ДРОН-2.0М (проміння Fe Kп). Встановлення кількісного елементного складу індивідуальних фаз здійснено методами скануючої електронної мікроскопії та локального енергодисперсійного рентгенівського спектрального аналізу (скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega 3 LMU з двома детекторами (вторинних електронів і зворотно розсіяних електронів) і енергодисперсійним рентгенівським аналізатором Oxford Instruments Aztec ONE з детектором X-MaxN20 і растровий електронний мікроскоп РЕММА-102-02 з енергодисперсійним рентгенівським спектрометром ЕДАР). У результаті експериментальних досліджень вперше визначено фазові рівноваги та побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану систем Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} при 600°C у повних концентраційних інтервалах. Встановлено існування 9 тернарних сполук. У спорідненій системі La–Ge–Bi синтезовано одну нову тернарну сполуку. Для всіх синтезованих тернарних сполук визначено параметри кристалічних структур. Встановлено особливості взаємодії компонентів у системах Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}, здійснено порівняння систем між собою та зі спорідненими потрійними системами та виведено кристалохімічні закономірності тернарних сполук. Ізотермічні перерізи діаграм стану чотирьох досліджених систем подібні в областях, багатих на ґадоліній, і відрізняються між собою у областях з невеликим вмістом ґадолінію. Розчинність третього компонента у бінарних сполуках, а також області гомогенності тернарних сполук є більшими в частинах систем, багатих на ґадоліній. У системах з Ge утворюється більша кількість тернарних сполук (6) у порівнянні з системами з Si (3), а у системах зі Sb – більше тернарних сполук (5), порівняно з системами зі Sn (4). Склади тернарних сполук знаходяться у відносно невеликому концентраційному інтервалі – 27-58 ат.% Gd, а їхні кристалічні структури належать до 7 структурних типів. Кристалічні структури 8 тернарних сполук систем Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} належать до ромбічної сингонії і лише структура сполуки Gd5Si0,62Sn3 належить до гексагональної сингонії. Для тернарних сполук систем Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} простежується тенденція до впорядкування різних сортів атомів. У структурах тернарних сполук систем Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} атоми найменшого розміру (Si чи Ge) характеризуються двома типами координаційних многогранників: тригональними призмами і октаедрами (тригональними антипризмами). Кристалічні структури тернарних сполук Gd2Ge3,84Sn0,92, Gd2Ge2,91Sn0,80, Gd2Ge3,28Sb0,65 і La2Ge3,03Bi0,81 характеризуються частковим невпорядкуванням атомів Ge і Sn, Sb чи Bi в окремих правильних системах точок, а також позиційним невпорядкуванням атомів Ge, змодельованим розщепленням позицій. Структури сполук є представниками серій лінійних неоднорідних структур, побудованих зрощенням фрагментів простих структурних типів: (3AlB2|CaF2|Po|CaF2)2 – Gd2Ge3,84Sn0,92; (3AlB2|2CaF2)2 – Gd2Ge2,91Sn0,80, Gd2Ge3,28Sb0,65 і La2Ge3,03Bi0,81. Кристалічна структура тернарної сполуки GdGe0,85-0,75Sn1,15-1,25 належить до гомологічної серії лінійних неоднорідних структур, побудованих зрощенням фрагментів структурних типів AlB2 і CaF2, що чергуються у послідовності (AlB2|2CaF2)2. У системах Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} при 600°C на ізоконцентратах 55,6 ат.% Gd існують бінарні і тернарні фази Gd5(M1-xM´x)4 (M = Si, Ge; M´ = Sn, Sb), структури яких належать до споріднених структурних типів Gd5Si4, Sm5Ge4, Eu5As4. При збільшенні вмісту атомів Sn чи Sb, структурні типи реалізуються у такому порядку: Gd5Si4 – Sm5Ge4 – Eu5As4. Кристалічна структура тернарної сполуки Gd5Si0,62Sn3 характеризується впорядкованим розташуванням усіх сортів атомів і побудована тривимірною укладкою октаедрів SiGd6 і GdSn6.

2. The dissertation is devoted to an experimental investigation of the chemical interaction of the components in the ternary systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}, establishment of the phase equilibria and construction of the isothermal sections of the phase diagrams at 600°C, synthesis and determination of the crystal structures of the compounds that form in these systems, and derivation of crystal-chemical regularities. The literature available on the phase diagrams of the binary systems Gd–{Si,Ge,Sn,Sb} and {Si,Ge}–{Sn,Sb} and the ternary systems R–Si–Ge and R–{Si,Ge}–{Sn,Sb,Bi}, and on the crystal structures of compounds in these systems was compiled and analyzed. Conclusions were drawn and possible aspects of the interaction of the components in the systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} were predicted. 32 two-component and 167 three-component alloys of the ternary systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}, and three alloys in the related ternary system La–Ge–Bi, were synthesized by arc melting, and annealed at 600°C. Chemical elements in the form of pieces were used as starting materials. The phase

composition of the alloys and the crystal structures of the individual phases were determined by X-ray powder diffraction, using patterns obtained on diffractometers STOE Stadi P (radiation Cu Kα1) and DRON-2.0M (radiation Fe Kα). The quantitative elemental composition of individual phases was analyzed by scanning electron microscopy and local energy-dispersive X-ray spectroscopy (scanning electron microscope Tescan Vega 3 LMU with two detectors (secondary electrons and back-scattered electrons), and an energy-dispersive X-ray analyzer Oxford Instruments Aztec ONE with the detector X-MaxN20, and a raster electron microscope REMMA-102-02 with an energy-dispersive X-ray spectrometer EDAR). Based on the experimental results, the phase equilibria at 600°C were determined for the first time and isothermal sections of the phase diagrams of the Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} systems in the whole concentration region were constructed. The existence of 9 ternary compounds was established. A new ternary compound was synthesized in the related La–Ge–Bi system. The complete crystal structures were determined for all ternary compounds. The main features of the interaction of the components in the systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} were established, the systems were compared with each other and with related ternary systems, and crystal-chemical regularities of the ternary compounds were deduced. The isothermal sections of the phase diagrams of the studied systems are similar in the Gd-rich region but differ from each other in the Gd-poor regions. The solubility of the third component in the binary compounds and the homogeneity ranges of the ternary compounds, are larger in the Gd-rich region of the systems. More ternary compounds are formed in the systems with Ge (6) than in the systems with Si (3), and more ternary compounds are formed in the systems with Sb (5) than in the systems with Sn (4). The compositions of the ternary compounds cover a relatively narrow concentration range, 27-58 at.% Gd, and their crystal structures belong to 7 structure types. The crystal structures of 8 ternary compounds of the Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} systems have orthorhombic symmetry, and only the structure of the compound Gd5Si0.62Sn3 has hexagonal symmetry. A tendency to ordering of the different chemical elements is observed. In the structures of the ternary compounds of the systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb}, the smallest atoms (Si or Ge) are characterized by two types of coordination polyhedron: trigonal prisms and octahedra (trigonal antiprisms). The crystal structures of the ternary compounds Gd2Ge3.84Sn0.92, Gd2Ge2.91Sn0.80, Gd2Ge3.28Sb0.65, and La2Ge3.03Bi0.81 are characterized by partial disorder of Ge and Sn, Sb, or Bi atoms on particular atom sites, as well as by positional disorder of Ge atoms, which was modeled by split positions. The structures of the compounds belong to homologous series of linear intergrowth structures built by the intergrowth of slabs characteristic of simple structure types: (3AlB2|CaF2|Po|CaF2)2 for Gd2Ge3.84Sn0.92, and (3AlB2|2CaF2)2 for Gd2Ge2.91Sn0.80, Gd2Ge3.28Sb0.65, and La2Ge3.03Bi0.81. The crystal structure of the ternary compound GdGe0.85-0.75Sn1.15-1.25 belongs to the homologous series of linear intergrowth structures combining fragments (AlB2|2CaF2)2. Several binary and ternary phases of the general formula Gd5(M1-xM′x)4 (M = Si, Ge; M′ = Sn, Sb) exist along the isoconcentrate of 55.6 at.% Gd in the systems Gd–{Si,Ge}–{Sn,Sb} at 600°C. The structures belong to the related structure types Gd5Si4, Sm5Ge4, and Eu5As4. When the content of Sn or Sb increases, the structure types are adopted in the following order: Gd5Si4 – Sm5Ge4 – Eu5As4. The crystal structure of the ternary compound Gd5Si0.62Sn3 is characterized by an ordered arrangement of the chemical elements and is built by a three-dimensional arrangement of SiGd6 and GdSn6 octahedra.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- 1. Dankevych, R.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. Crystal structure of the ternary compound Gd2Ge3.84Sn0.92. Chem. Met. Alloys 2019, 12 (1/2), 33–38.
- 2. Tokaychuk, Ya.; Vynnyk, R.; Dankevych, R.; Gladyshevskii, R. Crystal structure of the ternary compound La2Ge3.03Bi0.81. Chem. Met. Alloys 2020, 13 (3/4), 55–60.
- 3. Dankevych, R.; Tokaychuk, Ya. The ternary system Gd–Ge–Sb at 600°C. Chem. Met. Alloys 2022, 15 (1/2), 12–16.
- 4. Данкевич, Р.; Токайчук, Я.; Гладишевський, Р. Ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Gd–Si–Sb при 600°C. Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. 2023, 64, 51–63.
- 5. Dankevych, R.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. The ternary system Gd–Ge–Sn. Vopr. Khim. Khim. Technol. 2023, 23 (5), 14–23.
- 6. Dankevych, R.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. Phase relations in the system GdGexSn2-x (x = 0-1). Coll. Abstr. XIII International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, September 25–29, 2016; p. 96.
- 7. Данкевич, Р.; Токайчук, Я.; Гладишевський, Р. Кристалічна структура сполуки Gd2Ge3,85Sn0,93. Зб. наук. праць XVII Наукової конференції “Львівські хімічні читання – 2019”, м. Львів, Україна, 2–5 червня, 2019; с. Н41.
- 8. Dankevych, R.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. Phase equilibria in the ternary system Gd–Ge–Sn at 600°C. Coll. Abstr. XIV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, September 22–26, 2019; p. 76.
- 9. Данкевич, Р.; Токайчук, Я.; Гладишевський, Р. Система Gd–Si–Sb при 600°C. Зб. наук. праць XVIII Наукової конференції “Львівські хімічні читання – 2021”, м. Львів, Україна, 31 травня – 2 червня, 2021; с. Н28.
- 10. Dankevych, R. V.; Tokaychuk, Ya. O.; Gladyshevskii, R. E. Crystal structure of the new ternary compound Gd2Ge2.88Sb0.65. Зб. тез. допов. V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених “Хімічні проблеми сьогодення”, м. Вінниця, Україна, 22–24 березня, 2022; с. 43.
- 11. Данкевич, Р. В.; Токайчук, Я. О.; Гладишевський, Р. Є. Система Gd–Ge–Sb при 600°C. Матер. VI Всеукраїнської наукової конференції “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”, м. Житомир, Україна, 5 жовтня, 2022; с. 78–79.
- 12. Dankevych, R.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. The ternary system Gd–Si–Sn at 600°C. Coll. Abstr. XV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, September 25–27, 2023; p. 68.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: № 0118U003609, № 0121U109766

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токайчук Ярослав Олексійович

2. Yaroslav O. Tokaychuk

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5711-6085

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6506218972; Web of Science Researcher ID: GXV-2848-2022; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=en&user=qIP-y4gAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гулай Любомир Дмитрович
2. Lubomir D. Gulay

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3495-5027

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7004458695; Web of Science Researcher ID: P-9761-2019; https://scholar.google.com.ua/citations?user=xeAQq2cAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, буд. 13, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Барчій Ігор Євгенович
2. Igor Y. Barchiy

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3124-8346

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 57240697100; Web of Science Researcher ID: X-6280-2019; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=&user=H3ZjqJgAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ромака Любов Петрівна

2. Lyubov P. Romaka

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5793-4435

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7003460374; Web of Science Researcher ID: DQE-6992-2022; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=en&user=EJ-TAHwAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пукас Світлана Ярославівна

2. Svitlana Y. Pukas

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0615-6909

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6507449113; Web of Science Researcher ID: L-8736-2017; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=en&user=gLVAWn8AAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Дмитрів Григорій Степанович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Дмитрів Григорій Степанович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Жак Ольга Володимирівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна

