Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000669

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-01-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Ректора Львівського національного університету імені Івана Франка від 21.02.2024 р. № 225

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марискевич Данило Тарасович
2. Danylo T. Maryskevych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2763-4065

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: 05-02-2024

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: 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:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.051.139_ID 3696

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, 31.17.15

Тема дисертації:

1. Системи {Zr,Hf}–Al–M (M = Si, Ge, Sn, Sb): фазові рівноваги та кристалічна структура сполук.

2. Systems {Zr,Hf}–Al–M (M = Si, Ge, Sn, Sb): phase equilibria and crystal structures of the compounds.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена експериментальному дослідженню хімічної взаємодії компонентів у потрійних системах {Zr,Hf}–Al–{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. Методом електродугового сплавляння з подальшим гомогенізуючим відпалом при 600°C синтезовано 61 двокомпонентний і 357 трикомпонентних сплавів систем {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb}. Вихідними компонентами слугували компактні прості речовини високої чистоти. Фазовий склад зразків визначено за допомогою рентгенівської дифракції і спектроскопії. Масиви рентгенівських дифракційних даних отримано на порошкових дифрактометрах ДРОН-2.0М (проміння Fe Kα) та STOE Stadi P (проміння Cu Kα1), а локальний рентгеноспектральний аналіз проведено на растровому електронному мікроскопі РЕММА-102-02, оснащеному енергодисперсійним рентгенівським спектрометром ЕДАР, та на скануючому електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMU, оснащеному двома

детекторами (вторинних електронів і зворотно розсіяних електронів) та енергодисперсійним рентгенівським аналізатором Oxford Instruments Aztec ONE з детектором X-MaxN20. На основі результатів фазового аналізу, методом триангуляції побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану потрійних систем {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} при 600°C. Кристалічну структуру тернарних фаз визначено рентгенівськими дифракційними методами порошку (дифрактометри ДРОН-2.0М і STOE Stadi P) і монокристалу (дифрактометр Rigaku AFC7, детектор Mercury CCD, проміння Mo Kα). За результатами експериментальних досліджень встановлено фазові рівноваги та вперше побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану потрійних систем {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} при 600°C у повних концентраційних інтервалах. Підтверджено існування при 600°C 56 бінарних сполук, встановлено існування 29 тернарних сполук, 22 з яких – відкрито вперше. Для всіх синтезованих тернарних сполук визначено параметри кристалічних структур. На основі результатів експериментальних досліджень встановлено особливості взаємодії компонентів у системах {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb}, здійснено порівняльний аналіз систем між собою та зі спорідненими потрійними системами та встановлено кристалохімічні закономірності тернарних сполук. Спостерігається спорідненість систем з тим самим d-елементом (Zr чи Hf), а також попарна спорідненість систем з Zr та Hf і однакового p-елемента 14 (Si, Ge, Sn) чи 15 (Sb) групи періодичної системи. Найменшою кількістю тернарних сполук (2) характеризується система Hf–Al–Si, а найбільшою (по 5) – системи Zr–Al–Ge і Hf–Al–Sb. При переході від систем з Si до систем з Ge спостерігається ускладнення характеру взаємодії компонентів, що проявляється у збільшенні загальної кількості тернарних сполук від 5 у системах {Zr,Hf}–Al–Si до 9 у системах {Zr,Hf}–Al–Ge. При переході до систем зі Sn кількість тернарних сполук зменшується до 6, а заміна Sn на Sb приводить до збільшення кількості тернарних інтерметалідів до 9. Кристалічні структури тернарних сполук систем {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} належать до семи структурних типів; для більшості з них простежується тенденція до впорядкування атомів різних хімічних елементів. Наукова новизна одержаних результатів полягає в тому, що вперше визначено фазові рівноваги та побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану систем {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} при 600°C у повних концентраційних інтервалах; встановлено області гомогенності тернарних сполук і межі твердих розчинів на основі бінарних сполук; знайдено два неперервні ряди твердих розчинів між бінарними сполуками, 21 обмежений твердий розчин заміщення і один твердий розчин включення на основі бінарних інтерметалідів. Встановлено існування при 600°C 29 тернарних сполук (5 силіцидів, 9 ґерманідів, 6 станідів і 9 антимонідів), 22 з яких – нові. Для всіх тернарних сполук визначено параметри кристалічних структур; рентгенівськими дифракційними методами монокристалу та порошку розшифровано два нові структурні типи – ZrAl0.23Ge1.77 і Zr11Al3.34Ge6.66. На основі результатів експериментальних досліджень встановлено особливості взаємодії компонентів у потрійних системах {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb}, здійснено їхній порівняльний аналіз між собою та із спорідненими; виведено кристалохімічні закономірності тернарних сполук; встановлено взаємозв'язок між хімічним складом і кристалічною структурою тернарних фаз у досліджених системах.

2. The dissertation is devoted to an experimental investigation of the chemical interaction of the components in the ternary systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb}, establishment of the phase equilibria and construction of the isothermal sections at 600°C of the phase diagrams, synthesis and determination of the crystal structures of the compounds that form in these systems. Based on the observations, crystal-chemical regularities are derived. 61 two-component and 357 three-component alloys of the systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} were synthesized by arc melting, followed by homogenizing annealing at 600°C. Compact elemental substances of high purity served as starting components. The phase compositions of the samples were determined using X-ray diffraction and spectroscopy. X-ray diffraction patterns were obtained on powder diffractometers DRON-2.0M (radiation Fe Kα) and STOE Stadi P (radiation Cu Kα1), and local X-ray spectral analysis was performed on a raster electron microscope REMMA-102-02 equipped with an energy-dispersive X-ray spectrometer EDAR, and on a scanning electron microscope Tescan Vega 3 LMU equipped 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. Based on the results of the phase analysis, the isothermal sections of the phase diagrams of the ternary systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} at 600°C were constructed by the triangulation method. The crystal structures of the

ternary phases were determined by X-ray powder (diffractometers DRON-2.0M and STOE Stadi P) and single-crystal (diffractometer Rigaku AFC7, detector Mercury CCD, radiation Mo Kα) diffraction. Based on the experimental investigations, the phase equilibria were established, and the isothermal sections of the phase diagrams of the ternary systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} at 600°C were constructed in the whole concentration region, for the first time. The existence of 56 binary compounds at 600°C was confirmed, and 29 ternary compounds were observed, 22 of which were discovered for the first time. Crystallographic parameters were determined for all of the ternary compounds. Based on the experimental investigations, peculiarities of the interaction of the components in the systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} were pointed out. A comparative analysis of these and related ternary systems was carried out, and crystal-chemical regularities of the ternary compounds were deduced. Similarities were observed for systems with the same d-element (Zr or Hf), as well as between systems with Zr or Hf and the same p-element of group 14 (Si, Ge, Sn) or 15 (Sb) of the periodic system. The smallest number of ternary compounds (2) was found in the system Hf–Al–Si, and the largest number of ternary compounds (5 in each system) in the systems Zr–Al–Ge and Hf–Al–Sb. When moving from the systems with Si to the systems with Ge, the character of the interaction of the components becomes more complex, which is reflected in an increase of the total number of ternary compounds from 5 in the systems {Zr,Hf}–Al–Si to 9 in the systems {Zr,Hf}–Al–Ge. When moving to the systems with Sn, the number of ternary compounds decreases to 6, but the replacement of Sn by Sb leads to an increase to 9. The crystal structures of the ternary compounds of the systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} belong to seven structure types; for most of them, a tendency to ordering of atoms of different chemical elements was observed. The scientific novelty of the obtained results lies in the fact that for the first time the phase equilibria were determined and isothermal sections of the phase diagrams of the systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} at 600°C were constructed in the whole concentration range; the homogeneity ranges of the ternary compounds and solid solutions based on binary compounds were established; two continuous solid solutions between binary compounds, 21 limited solid solutions of the substitution type and one solid solution of the inclusion type based on binary intermetallics were found. The existence of 29 ternary compounds (5 silicides, 9 germanides, 6 stannides, and 9 antimonides) at 600°C was established, 22 of which are new. For all of the ternary compounds the crystal structures were determined and, by means of X-ray singe-crystal and powder diffraction, two new structure types, ZrAl0.23Ge1.77 and Zr11Al3.34Ge6.66, were determined. Based on the results of the experimental investigations, peculiarities of the interaction of the components in the ternary systems {Zr,Hf}–Al–{Si,Ge,Sn,Sb} were emphasized, and crystal-chemical regularities of the ternary compounds were deduced. Relationships between the chemical composition and the crystal structure of the ternary phases in the studied systems were established.

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. Maryskevych, D.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. Structural evolution in the systems TAl3-xGex (T = Zr, Hf). Solid State Phenom. 2019, 289, 71–76.
- 2. Maryskevych, D.; Tokaychuk; Ya., Prots, Yu.; Akselrud, L.; Gladyshevskii, R. Crystal structure of Zr5AlGe3. Chem. Met. Alloys 2019, 12 (1/2), 39–43.
- 3. Марискевич, Д.; Токайчук, Я.; Гладишевський, Р. Кристалічна структура алюмогерманіду Zr5Al2,70Ge0,30. Вісник Львів. ун-ту. Серія хім. 2020, 61, 63–70.

- 4. Maryskevych, D.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. The ternary system Zr–Al–Sn: isothermal section of the phase diagram at 600°C and crystal structures of the compounds. Chem. Met. Alloys 2022, 15 (1/2), 1–7.
- 5. Maryskevych, D.; Tokaychuk, Ya.; Akselrud, L.; Gladyshevskii, R. The structure type ZrAl0.23Ge1.77. Phys. Chem. Solid State 2023, 24 (3), 448–452.
- 6. Maryskevych, D.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. Structural evolution in the systems TAl3-xGex (T = Zr, Hf). Progr. Abstr. 21 International Conference on Solid Compounds of Transition Elements, Vienna, Austria, March 25–29, 2018; p. 24.
- 7. Марискевич, Д. Т.; Токайчук, Я. О.; Гладишевський, Р. Є. Кристалічна структура сполуки HfAl2,7Ge0,3. Зб. тез. допов. І Міжнародної (XI Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених “Хімічні проблеми сьогодення”, м. Вінниця, Україна, 27–29 березня, 2018; с. 103.
- 8. Марискевич, Д. Т.; Токайчук, Я. О.; Гладишевський, Р. Є. Тернарні алюмогерманіди ZrAl2,5Ge0,5 і HfAl2,4Ge0,6. Тези допов. X Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів “Хімічні Каразінські читання – 2018”, м. Харків, Україна, 23–25 квітня, 2018; с. 35–36.
- 9. Марискевич, Д.; Токайчук, Я.; Гладишевський, Р. Кристалічна структура алюмогерманіду Zr5Al2,7Ge0,3. Зб. наук. праць XVII Наукової конференції “Львівські хімічні читання – 2019”, м. Львів, Україна, 2–5 червня, 2019; с. H39.
- 10. Maryskevych, D.; Tokaychuk, Ya.; Prots, Yu.; Akselrud, L.; Gladyshevskii, R. Crystal structure of the compound Zr5AlGe3. Coll. Abstr. XIV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, September 22–26, 2019; p. 106.
- 11. Марискевич, Д.; Токайчук, Я.; Аксельруд, Л.; Гладишевський, Р. Кристалічна структура сполуки ZrAl0,23Ge1,77. Зб. наук. праць XVIII Наукової конференції “Львівські хімічні читання – 2021”, м. Львів, Україна, 31 травня – 2 червня, 2021; с. H30.
- 12. Maryskevych, D. T.; Tokaychuk, Ya. O.; Gladyshevskii, R. E. Crystal structure of the new ternary compound Zr5Al0.41Sn2.59. Зб. тез. допов. V Міжнародної (XV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених “Хімічні проблеми сьогодення”, Вінниця, Україна, 22–24 березня, 2022; с. 51.
- 13. Марискевич, Д. Т.; Токайчук, Я. О.; Гладишевський, Р. Є. Тернарні сполуки системи Zr–Al–Sn (600°C). Матер. VI Всеукраїнської наукової конференції “Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи”, м. Житомир, Україна, 5 жовтня, 2022; с. 87–88.
- 14. Maryskevych, D.; Tokaychuk, Ya.; Gladyshevskii, R. Crystal structure of the ternary compounds HfAl2.67Sb0.33 and Hf2AlSb3. Coll. Abstr. XV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, September 25–27, 2023; p. 91.

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, № 0121U107937

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гладишевський Роман Євгенович

2. Roman Y. Gladyshevskii

Кваліфікація: д. х. н., професор, академік НАН України, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1320-155X

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7003433657; Web of Science Researcher ID: A-4144-2015; https://scholar.google.com.ua/citations?user=jbOWpl0AAAAJ

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. Сабов Мар'ян Юрійович
2. Marian Y. Sabov

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0346-0734

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 56041689700; Web of Science Researcher ID: J-8608-2015; https://scholar.google.com.ua/citations?user=4Tm5wMAAAAAJ

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Василечко Леонід Орестович
2. Leonid O. Vasylechko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-4231-9186

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7003991882; Web of Science Researcher ID: R-4447-2017; https://scholar.google.com.ua/citations?user=Lj0MhuEAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Заремба Василь Іванович

2. Vasyl I. Zaremba

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0995-4225

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7007183033; Web of Science Researcher ID: GJQ-9197-2022; https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=PctyoioAAAAJ

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. Коник Марія Богданівна

2. Mariya B. Konyk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0000-6921-8460

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6603057828; Web of Science Researcher ID: DAA-0893-2022; https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=a3LwazEAAAAJ

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

