

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U100356

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Деленко Тарас Олегович

2. Delenko Taras Olehovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.01

Назва наукової спеціальності: Неорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 12-02-2020

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.051.10

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Изотермічні перерізи (600°C) діаграм стану та кристалічні структури сполук систем {Dy,Yb}-Ga-{Si,Ge}
2. Isothermal sections (600°C) of the phase diagrams and crystal structures of compounds of the systems {Dy,Yb}-Ga-{Si,Ge}

Реферат:

1. Методами рентгенівського фазового та структурного аналізу, скануючої електронної мікроскопії та локального енергодисперсійного рентгенівського спектрального аналізу вперше визначено фазові рівноваги та кристалічну структуру сполук у потрійних системах {Dy,Yb}-Ga-{Si,Ge} при 600°C. Вперше побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану цих потрійних систем при 600°C у повному концентраційному інтервалі. Встановлено утворення у цих системах 22 тернарних сполук, 11 з яких – нові. У споріднених системах {Tb,Ho}-Ga-Ge та Ho-Ga-Si синтезовано 4 нові тернарні сполуки. Для сполук DyGa_{2,68}Ge_{0,32}, DyGa_{2,32}Ge_{0,68} та YbGa_{1,13}Si_{0,87} виміряно температурні залежності питомого електроопору, а для сполук DyGa_{2,68}Ge_{0,32}, DyGa_{2,32}Ge_{0,68} – диференціальної термо-е.р.с. Структурні типи, що реалізуються у системах Dy-Ga-{Si,Ge} на ізоконцентраціях 25 ат.% Dy, належать до найщільніших упаковок атомів – Ta(Rh_{0,33}Pd_{0,67})₃ (hP40, P63/mmc, (hhhc)2), Mg₃In (hR48, R-3m, (hhcc)2), PuAl₃ (hP24, P63/mmc, (hcc)2) та Cu₃Au (cP4, Pm-3m, (c)3). Заміщення атомів Ga на атоми р-елементів IV групи (Si, Ge) приводить до утворення

структур з меншою гексагональністю (60–0 % для вмісту 0–35 ат.% Ge). Структури сполук $Dy_2Ga_{2,23-1,24}Ge_{4,77-5,76}$ та $DyGa_{0,12}Ge_{1,80}$ належать до серій лінійних неоднорідних структур. Структура сполуки $Dy_2Ga_{2,23-1,24}Ge_{4,77-5,76}$ побудована з фрагментів структурних типів $BaAl_4$ ($tI10$, $I4/mmm$), AlB_2 ($hP3$, $P6/mmm$) та σ - Po ($cP1$, $Pm-3m$), а структура $DyGa_{0,12}Ge_{1,80}$ – з фрагментів структурних типів AlB_2 та CaF_2 ($cF12$, $Fm-3m$). Структури тернарних сполук з вмістом 33,3–40,0 ат.% РЗМ характеризуються тригонально-призматичною координацією атомів р-елементів. Склади сполук визначаються концентрацією валентних електронів (2–4 зв'язки для $КВЕМ = 6-4$ на один атом р-елемента). При переході від щільноупакованих структур до структур з тригонально-призматичною координацією атомів р-елементів спостерігається тенденція до скорочення міжатомних віддалей (посилення взаємодії між атомами р-елементів).

2. By means of X-ray phase and structure analyzes, scanning electron microscopy and local energy-dispersive X-ray spectroscopy, the phase equilibria and crystal structure of compounds in the ternary systems $\{Dy, Yb\}-Ga-\{Si, Ge\}$ at $600^\circ C$ were determined. Isothermal sections of the phase diagrams of these systems at $600^\circ C$ were constructed in the whole concentration range for the first time. The formation of 22 ternary compounds, 11 of which are new, was established in these systems. In the related systems $\{Tb, Ho\}-Ga-Ge$ and $Ho-Ga-Si$, four new ternary compounds were synthesized. The crystal structures of 15 new compounds were determined and the homogeneity ranges of three other ternary compounds were established. The temperature dependencies of the electrical resistivity were measured for three compounds, $DyGa_{2.68}Ge_{0.32}$, $DyGa_{2.32}Ge_{0.68}$, and $YbGa_{1.13}Si_{0.87}$, and differential thermoelectric power was measured for $DyGa_{2.68}Ge_{0.32}$ and $DyGa_{2.32}Ge_{0.68}$. The structure types that exist in the systems $Dy-Ga-\{Si, Ge\}$ at 25 at.% Dy belong to the family of close-packed structures: structure types $Ta(Rh_{0.33}Pd_{0.67})_3$ ($hP40$, $P63/mmc$, $(hhchc)_2$), Mg_3In ($hR48$, $R-3m$, $(hhcc)_2$), $PuAl_3$ ($hP24$, $P63/mmc$, $(hcc)_2$), and Cu_3Au ($cP4$, $Pm-3m$, $(c)_3$). Substitution of p-element atoms of group IV (Si, Ge) for Ga leads to the formation of structures with lower hexagonality (60–0 % within the composition range 0–35 at.% Ge). The structures of the compounds $Dy_2Ga_{2.23-1.24}Ge_{4.77-5.76}$ and $DyGa_{0.12}Ge_{1.80}$ belong to homologous series of structures formed by linear intergrowth of slabs characteristic of simple structure types: $BaAl_4$ ($tI10$, $I4/mmm$), AlB_2 , and σ - Po ($cP1$, $Pm-3m$) for $Dy_2Ga_{2.23-1.24}Ge_{4.77-5.76}$, and AlB_2 and CaF_2 ($cF12$, $Fm-3m$) for $DyGa_{0.12}Ge_{1.80}$. The structures of the ternary compounds with 33.3–40.0 at.% rare-earth element are characterized by trigonal-prismatic coordination of the p-element atoms. The compositions of the compounds are determined by the valence electron concentration (2–4 bonds for $VECM = 6-4$ per p-element atom). At the transition from close-packed structures to structures with trigonal-prismatic coordination of the p-element atoms, a tendency toward contraction of the interatomic distances (increase of the interaction between the p-element atoms) is observed.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гладішевський Роман Євгенович
2. Gladyshevskii Roman Ye.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Неділько Сергій Андрійович
2. Nedilko Sergiy A.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Іващенко Інна Алімівна
2. Ivashchenko Inna Alimovna

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

