# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0416U000629

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 17-03-2016

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Михалічко Віталія Михайлівна
2. Mykhalichko Vitaliia Mykhaylivna

**Кваліфікація:**

**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:** 02-03-2016

**Спеціальність за освітою:** 8.070301

**Місце роботи здобувача:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

**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:** 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

**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. Взаємодія компонентів у системах {Gd, Er}-Re-{Si, Ge} та споріднених з ними

2. Interaction of the components in the systems {Gd, Er}-Re-{Si, Ge} and related systems

**Реферат/анотація:**

1. На основі результатів рентгенофазового, рентгеноструктурного, мікроструктурного, локального рентгеноспектрального та диференціального термічного аналізів досліджено фазові рівноваги при 800°C у потрійних системах {Gd, Er}-Re-{Si, Ge} та Gd-Re-{Al, Ga, Sn} у повному концентраційному інтервалі. Побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану систем {Gd, Er}-Re-{Si, Ge} та Gd-Re-{Al, Ga, Sn} при 800°C. Досліджено розчинність бінарними сполуками третього компонента і виявлено, що лише GdSi1,5, Gd5Si3 та GdGe1,97 розчиняють 3, 4 та 4 ат.% Re, відповідно. У цих системах підтверджено існування 8 і знайдено 4 нові тернарні сполуки; для всіх тернарних і для 7 бінарних сполук визначено координати атомів. У споріднених системах {Gd, Er}-T-{Si, Ge} та Y-Re-Ga знайдено та встановлено кристалічну структуру для 45 сполук, з них 26 - нові. Для 63 сполук визначено координати атомів. Розшифровано чотири нові структурні типи - ErRe2Si4, Gd4ReGe8, Gd4Ag1,06Ge8,70 та YRe0,15Ga3. Встановлено особливості утворення інтерметалічних фаз у системах R-Re-M (M - p-елемент III, IV груп), вплив електронного та розмірного чинників на їхні кристалічні структури. Вивчено реалізацію фаз та їхні кристалічні структури для складів RT4M2, R2T3M5,

RT1-xM2, де R - Gd та Er, T - d-елемент, M - Si та Ge. Для сполук складу RT4M2 виявлено морфотропні переходи структурних типів CeAu4Si2 - NdRe4Si2 - CeRe4Si2 - ZrFe4Si2 - YFe4Ge2 - HoFe4Ge2; для R2T3M5: U2Mn3Si5 - U2Co3Si5 - Lu2Co3Si5 - Nd2Os3Si5; для RT1-xM2: CeNiSi2 - YIrGe2 - LaMnSi2 - NdRuSi2 - ZrCrSi2 - U3Ni4Si4.

2. Based on X-ray diffraction, microstructure, energy-dispersive X-ray and differential thermal analysis, the phase equilibria at 800°C in the ternary systems {Gd, Er}-Re-{Si, Ge} and Gd-Re-{Al, Ga, Sn} were investigated in the whole concentration range and the isothermal sections of the phase diagrams were constructed. The solubility of the third component in the binary compounds was investigated and it was found that GdSi1.5, Gd5Si3, and GdGe1.97 dissolve 3, 4, and 4 at.% Re, respectively. The existence of eight ternary compounds was confirmed and four new ternary compounds were found; the crystal structures of all the ternary and seven binary phases in the investigated systems were refined. In the related systems {Gd, Er}-T-{Si, Ge} and Y-Re-Ga, 45 compounds were found and the atom coordinates were determined for all of them. 26 of these compounds are new. In total the crystal structures of 63 phases were determined. Four new structure types - ErRe2Si4, Gd4ReGe8, Gd4Ag1.06Ge8.70 and YRe0.15Ga3 - were solved by direct methods. The new monoclinic structure type ErRe2Si4 is closely related to the AlB2 type. The position 1a of space group P6/mmm, occupied by Al atoms in AlB2, corresponds to a position 4d in space group C2/c, and the position of the B atoms (2d) to two 4e positions, which are occupied by Si atoms in ErRe2Si4. Two additional positions 8f in the new structure type are occupied by Re and Si atoms. The Er atoms form straight chains, which run along the crystallographic direction [101], whereas the Re atoms form zigzag chains along [110], and the Si atoms branched chains along [201]. The coordination polyhedra of the Er atoms form dense layers with octahedral voids between them. The crystal structure of the new ternary germanide Gd4ReGe8 represents a new structure type. The structure is related to the CeNiSi2 type. The two structure types contain similar fragments (trigonal prisms and square antiprisms). The structure type Gd4ReGe8 can be derived from the CeNiSi2 type by lowering the symmetry and increasing the unit cell by a factor four. The structure can be represented as a packing of Gd-centered polyhedra with part of voids occupied by Re atoms. The crystal structure of Gd4ReGe8 is also closely related to the structure type Tb4FeGe8, where two Fe sites, with site occupancies of 80 and 20%, respectively, were found. Four Re sites are partly occupied in the structure of Gd4ReGe8. The crystal structure of the new structure type Gd4Ag1.06Ge8.70 can be described as a stacking of trigonal prisms (fragments of the structure type AlB2), square antiprisms (fragments of the structure type BaAl4), and empty cubes (fragments of the structure type ?-Po). Similar layers are present in the structures of other compounds, for example SmNiGe3, ScNiSi3, Ce2CuGe6, and La2AlGe6. A peculiarity of the structure of Gd4Ag1.06Ge8.70 is the packing of Gd-centered polyhedra along the crystallographic directions [100] and [010]. Two types of interlayer occur in the structure: one of them is surrounded by Gd atoms, the other one by Ge atoms. The former is empty, whereas the latter is occupied by Ag atoms. The new structure type YRe0.15Ga3 is closely related to the structure of perovskite. The difference between the two structures resides in site splitting and defects. The crystal structure of YRe0.15Ga3 can be represented as a framework built up from cuboctahedra centered by Y atoms. Some of the octahedral voids in the framework are occupied by Re atoms. The influence of electronic and size factors on the crystal structures of the intermetallic compounds in the systems R-Re-M (M - p-element of groups III, IV) was analyzed. The phase formation and crystal structures were studied in detail for the compositions RT4M2, R2T3M5, and RT1-xM2, where R = Gd and Er, T = d-element, and M = Si and Ge. The following morphotropic transitions of the structure types were found for the compounds of composition RT4M2: CeAu4Si2 - NdRe4Si2 - CeRe4Si2 - ZrFe4Si2 - YFe4Ge2 - HoFe4Ge2; for R2T3M5: U2Mn3Si5 - U2Co3Si5 - Lu2Co3Si5 - Nd2Os3Si5; for RT1-xM2: CeNiSi2 - YIrGe2 - LaMnSi2 - NdRuSi2 - ZrCrSi2 - U3Ni4Si4.

### 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 ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Гладишевський Роман Євгенович

2. Gladyshevskii Roman Yevhenovych;

**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. Барчій Ігор Євгенович

2. Барчій Ігор Євгенович

**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. Солопан Сергій Олександрович

2. Солопан Сергій Олександрович

**Кваліфікація:** к.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

**Рецензенти**

## VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** Каличак Ярослав Михайлович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні** Каличак Ярослав Михайлович

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** Юрченко Т.А.

