Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0424U000102

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-05-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чорна Наталія Олегівна
2. Nataliya Chorna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 12-06-2024

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Код за ЄДРПОУ: 05408102

Місцезнаходження: вул. Руська, буд. 56, Тернопіль, Тернопільський р-н., 46001, 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): Д 35.051.10

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: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Взаємодія компонентів у системах {La, Gd}–{Mn, Fe}–Zn (фазові рівноваги, кристалічна структура та деякі властивості сполук)

2. Interaction of components in the systems {La, Gd}–{Mn, Fe}–Zn (phase equilibria, crystal structure and some properties of compounds)

Реферат/анотація:

1. У цій роботі вперше досліджено взаємодію компонентів у тернарних системах при 670 K (система La–Fe–Zn) та 770 K (системи La–Mn–Zn, Gd–Fe–Zn, Gd–Mn–Zn), встановлено фазові рівноваги та побудовано ізотермічні перерізи відповідних діаграм стану систем у повному концентраційному інтервалі, визначено області гомогенності, підтверджено або виявлено існування нових тернарних сполук та встановлено їх кристалічну структуру. Дослідження фазових рівноваг та кристалічної структури проводили методами рентгенівської дифракції порошку, скануючої електронної мікроскопії, кристалічну структуру деяких сполук встановлювали методом монокристалу. Склад деяких зразків у ролі електродних матеріалів прототипів хімічних джерел електричної енергії досліджували за допомогою рентгенівської флуоресцентної та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопій. З метою пошуку нових перспективних матеріалів для акумуляторів досліджували електрохімічні та гідрогенсорбційні властивості фаз. У досліджених потрійних

системах вперше виявлено існування 10 тернарних сполук. Методом монокристалу визначено структуру 4 нових тернарних фаз, методом порошу – 5 нових тернарних фаз. Знайдено нову сполуку приблизного складу ~ Gd23Mn46Zn31, кристалічна структура якої поки що не встановлена. Проведено дослідження електрохімічних властивостей сполук, що кристалізуються у структурах типів CsCl, KHg2, MgCu2, CaCu5, Th2Ni17 і BaCd11. Вивчено вплив легуючого компонента на гідрогенсорбційні властивості фаз зі структурою MgCu2, а також досліджено корозійну стійкість електродів методами вольтамперометрії та електрохімічної імпедансної спектроскопії. Досліджено електронну структуру сполуки La2Fe2Zn15 та функцію локалізації електронної густини. Встановлено, що сполука LaFe2,12Zn9,88 кристалізується в новому типі структури, похідному від бінарного типу Ce3Zn22.

2. In this work, the interaction of components in the ternary systems at 670 K (La–Fe–Zn system) and 770 K (La–Mn–Zn, Gd–Fe–Zn, Gd–Mn–Zn systems) is studied, the phase equilibria are established, and the isothermal sections of the corresponding phase diagrams of the systems in the entire concentration range were constructed. New ternary compounds were confirmed or found for the first time, and their crystal structures and homogeneity ranges were established. Investigation of the phase equilibria and crystal structure was carried out by the methods of X-ray powder diffraction and scanning electron microscopy; the crystal structure of some samples was determined by X-ray single crystal diffraction. The composition of some samples as electrode materials in prototypes of chemical sources of electrical energy was investigated using X-ray fluorescence and energy-dispersive X-ray spectroscopy. In order to find new promising materials for batteries, the electrochemical and sorption properties of the phases were studied. The existence of 10 ternary compounds was found in the investigated ternary for the first time. The structure of 4 new ternary phases was determined by the X-ray single crystal diffraction, and 5 new ternary phases were determined by X-ray powder diffraction. A new compound of approximate composition ~Gd23Mn46Zn31, the structure of which has not yet been established, was detected. The electrochemical properties of compounds crystallized in CsCl, KHg2, MgCu2, CaCu5, Th2Ni17, and BaCd11 structures were studied. The influence of the doping component on the hydrogen sorption properties of the phases with the MgCu2 structure was studied, and the corrosion resistance of the electrodes was investigated by the methods of voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy. The electronic structure of the La2Fe2Zn15 compound and the electron density localization function were studied. It was established that the compound LaFe2,12Zn9,88 crystallizes in a new type of structure derived from the binary type Ce3Zn22.

Державний реєстраційний номер ДіР: 0113U003056, 0115U00325, 0117U007192, 0118U003609, 0121U107937

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

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

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Chorna, N.O., Kordan, V.M.,. Mykhailevych, A.M, Zelinska, O.Ya., Zelinskiy, A.V, Kluziak, K., Serkiz, R.Ya., Pavlyuk, V.V. (2021). Electrochemical hydrogenation, lithiation and sodiation of the GdFe2-xMx and GdMn2-xMx intermetallics. Issues of Chemistry and Chemical Technology, 2, 139-149. (Q3) DOI: 10.32434/0321-4095-2021-135-2-139-149
- 2. Дичко , Н., Зелінська, О., Зелінський, А., Павлюк, В. (2015). Ізотермічний переріз діаграми стану системи La–Fe–Zn при 670 K. Вісн. Львів. ун-ту. Серія хім., 56(1), 46–52.
- 3. Чорна, Н., Андраш, В., Кордан, В., Зелінська, О., Зелінський, А., Павлюк, В. (2018). Кристалічна структура сполуки LaZn5-xMnx та електрохімічні властивості. Вісник Львівського університету. Серія хімічна, 59 (1), 107–114. https://doi.org/10.30970/vch.5901.107

- 4. Chorna, N., Sagan, N., Zelinska, O., Kordan, V., Zelinskiy, A., Pavlyuk, V. (2018). Phase equilibria in the ternary system Gd-Fe-Zn and electrochemical hydrogenation of the phases. Chem. Met. Alloys, 11, 27-33.
- 5. Chorna, N., Kordan, V., Nytka, V., Zelinska, O., Tarasiuk, I., Zelinskiy, A., Pavlyuk, V. (2020). Electrochemical hydrogenation of the R2Zn17-xMnx phases (R = Y, La, Gd, Tb). Chem. Met. Alloys., 13, 78-84. https://doi.org/10.30970/cma13.0409
- 6. Дичко, Н.О., Зелінська, О.Я., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В. (2012) Дослідження сплавів системи La–Fe–Zn при вмісті цинку 0-70 ат. % Zn. Матер. ІІ Всеукр. наук.-практ. конф. молодих вчених та студентів «Фізика і хімія твердого тіла. Стан, досягнення і перспективи», Луцьк, Україна, 19-20 жовтня, 2012,с. 59.
- 7. Дичко, Н.О., Зелінська, О.Я., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В. (2013) Ізотермічний переріз діаграми стану системи La–Fe–Zn при 670 К. Зб. наук. праць XII наук. конф. «Львівські хімічні читання–2013», Львів, Україна, 26-29 травня, 2013, Н24.
- 8. Dychko, N.O., Sagan, N.V., Зелінська, О.Я., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В. (2014) Phase equilibria in the ternary system Gd–Fe–Zn. Матераіли ІІІ Всеукраїнської науково-практичної конференції молодих вчених та студентів «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення і перспективи», Луцьк, Україна, 24-25 жовтня, 2014, с. 100.
- 9. Дичко Н., Зелінська, О., Зелінський, А., Павлюк, В. (2015) Кристалічна і електронна структура сполуки La2Fe2Zn15. Зб. наук. праць XV наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2015”, Львів, Україна, 24-27 травня, 2015, с. 268.
- 10. Dychko, N., Sagan, N., Zelinska, O., Zelinskiy, A., Pavlyuk V. (2015) Solid solutions on the basis of the binary phases in the {La, Gd}–Fe–Zn systems. Proc. Int. Scient. Congr. “Modern Directions in Chemistry, Biology, Pharmacy and Biotechnology” Lviv, Ukraine, 29 September - 2 October, 2015, p. 91.
- 11. Dychko, N.O., Andrash, V.V., Porodko, O.Yu., Zelinska, O.Ya., Pavlyuk V.V. (2016) Phase equlibria in the {La,Gd}-Mn-Zn ternary systems at 0-70 at. % Zn. III International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, 25-29 September, 2016, p. 66.
- 12. Дичко, Н., Андраш, В., Зелінська, О., Зелінський, А., Павлюк В. (2017) Ізотермічний переріз діаграми стану системи La–Mn–Zn при 500 °С. Зб. наук. праць XVI наукової конференції «Львівські хімічні читання –2017» Львів, Україна, 28-29 травня, 2017, Н. 48.
- 13. Chorna, N., Andrash, V., Zelinska, O., Kordan, V., Zelinskiy, A. Pavlyuk, V., Serkiz, R. (2018) Structural and electrochemical characteristics of the La-Mn-Zn Alloys. 21th International seminar on physics and chemistry of solids, Częstochowa, Poland, 10-13 June, 2018, p 85.
- 14. Chorna, N., Andrash, V., Zelinska, O., Kordan, V., Zelinskiy, A. Pavlyuk, V., Serkiz, R. Isothermal section of the La–Mn–Zn phase diagram at 500□C. XX Українська конференція з неорганічної хімії, Дніпро, Україна, 17-20 вересня, 2018, с. 92.
- 15. Чорна, Н.О., Думас, І.Ю., Мирош, Л.В., Зелінська, О.Я., Кордан, В.М., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В. (2018) Структурні та електрохімічні характеристики фаз LaZn1-xFex та GdZn1-xFex, x = 0,4. V Всеукраїнська науково-практична конференція молодих вчених та студентів «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення і перспективи» Луцьк, Україна, 25-26 жовтня, 2018, с. 68-70.
- 16. Чорна, Н.О., Кордан, В.М., Зелінська, О.Я., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В. Синтез та електрохімічне гідрування фаз системи Gd–Fe–Zn із стехіометрією 1:2. ІІ Міжнародна (XII Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення», Вінниця, Україна, 19-21 березня, 2019, с. 67.
- 17. Чорна, Н., Кордан, В., Зелінська, О., Зелінський, А., Ковальські, Ґ., Серкіз, Р., Павлюк, В. (2019) Електрохімічні властивості деяких інтерметалідів зі структурою CsCl, KHg2 та MgCu2. Зб. наук. праць XVII Наук. конф «Львівські хімічні читання – 2019», Львів, Україна, 2-5 червня, 2019, У 9.
- 18. Chorna, N., Zelinska, O., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Zelinskiy, A., Kordan, V., Mar, A. (2019) Crystal structure of new zinc-rich ternary compounds Gd2Zn17-xMx (M = Mn, Fe). XIV International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds, Lviv, Ukraine, 22-26 September, 2019, p 119.

- 19. Chorna, N.O., Kordan, V.M., Zelinska, O.Ya., Zelinskyy, A.V., Pavlyuk, V.V. (2020) The influence of doping components on the electrochemical hydrogenation of the GdFe2-xMx phases. III International (XIII Ukrainian) Scientific Conference for Students and Eoung Scientists Current Chemical Problems, Vinnytsia, Ukraine, 25–27March, 2020, p. 62.
- Чорна, Н.О., Кордан, В.М., Зелінська, О.Я., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В. (2020) Електрохімічне гідрування інтерметаліду GdMn2 та його легованих похідних. XXI Міжнародній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Сучасні проблеми хімії», Київ, Україна, 20-22 травня, 2020, с 131.
- 21. Chorna, N., Zelinska, O., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Zelinskiy, A., Kordan, V., Mar, A. (2020) Crystal structure of the new ternary compound La3Fe6,36Zn29,64. XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids (ISPCS'20), Lviv, Ukraine, 17-19 June, 2020, p. 34.
- 22. Чорна, Н., Кордан, В., Зелінська, О., Зелінський, А., Павлюк, В. (2020) Електрохімічне гідрування фаз R2Zn17-xMnx, (R = La, Gd). VI Всеукраїнська науково-практична конференція молодих вчених та студентів «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення і перспективи», Луцьк, Україна, 16-17 жовтня, 2020, с. 44-45.
- Chorna, N.O., Kordan, V.M., Zelinska, O.Ya., Zelinskyy, A.V., Pavlyuk, V.V. (2021) Solubility of manganese in the binary La–Zn ang Gd–Zn intemetallics. IV International (XIV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2021), Vinnytsia, Ukraine, 23-25 March, 2021, p. 72.
- 24. Чорна, Н.О., Кордан, В.М., Зелінська, О.Я., Зелінський, А.В., Павлюк, В.В., Мар А. (2021) Кристалічна структура сполуки LaMn0,42-0,38Zn0,58-0,62. Зб. наук. праць XVIII Наук. конф «Львівські хімічні читання – 2021», Львів, Україна, 31 травня-2 червня, 2021, Н 34.
- 25. Chorna, N., Porodko, O., Zelinska, O., Kordan, V., Zelinskiy, A., Pavlyuk, V. (2023) New ternary compound GdMn1-xZn1+x, −0.075 ≤ x ≤ 0.075 VI International (XVI Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2023), Vinnytsia, Ukraine, 21-23 March, 2023, p . 42.
- Чорна, Н., Кордан, Михайлевич, А., В., Зелінська, О., Зелінський, А., Серкіз, Р., Клузяк, К., Павлюк, В. (2023) Структурні та електрохімічні характеристики інтерметалідів систем {La, Gd}–{Mn, Fe}–Zn. Зб. наук. праць XIX Наук. конф. «Львівські хімічні читання – 2023", Львів, Україна, 29–31 травня, 2023, с. 52.
- 27. Chorna, N., Andrash, V., Zelinska, O., Kordan, V., Zelinskiy, A., Pavlyuk, V. (2023) New ternary compounds of the La-Mn-Zn system. International Conference on Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds (IMC-XV), Lviv, Ukraine, 25-27 September, 2023, p. 95.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість: економія енергоресурсів; економія матеріалів

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0113U003056, 0115U00325, 0117U007192, 0118U003609, 0121U107937

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Павлюк Володимир Васильович

2. Volodymyr Pavlyuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

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. Шаповал Павло Йосипович
2. Pavlo Shapoval

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зубака Оксана Василівна
2. Oksana Zubaka

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

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

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Павлюк Володимир Васильович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Обушак Микола Дмитрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Яремко З.М.
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна

