Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U003101

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-09-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Смітюх Олександр Вікторович
2. Smitiukh Oleksandr Viktorovych

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: 14-09-2018

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: пр. Волі, 13, м. Луцьк, Луцький р-н., Волинська обл., 43025, 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): К 61.051.03

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

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, 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: Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: пр. Волі, 13, м. Луцьк, Луцький р-н., Волинська обл., 43025, 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. Фазові рівноваги і кристалічна структура проміжних фаз у системах R2X3 – R´2X3 – PbX (DIVX2) (R, R´– Y, La, Ce, Pr, Tb, Dy, Ho, Er; DIV – Si, Ge, Sn; X – S, Se) за температури 770 K

2. Phase equilibria and crystal structure of intermediate phases in the R2X3 – R'2X3 – PbX (DIVX2) systems (R, R' – Y, La, Ce, Pr, Tb, Dy, Ho, Er; DIV – Si, Ge , Sn; X – S, Se) at 770 K

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вивченню фазових рівноваг за температури 770 K у квазіпотрійних системах R2X3 – R´2X3 – PbX (DIVX2) (R, R´– Y, La, Pr, Er; DIV – Si, Ge, Sn; X – S, Se) та кристалічної структури нових тетрарних фаз у цих системах. За результатами РФА побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану 28 квазіпотрійних систем типу R2X3 – R´2X3 – PbX (DIVX2) (R, R´– Y, La, Pr, Er; DIV – Si, Ge, Sn; X – S, Se) за температури 770 K. Нові тетрарні фази Er2,34R0,66Ge1,28S7 (R – La, Ce, Pr) кристалізуються у структурному типі Dy3Ge1,25S7 (ПГ P63). ПСТ 6c, яку займають атоми Dy, заселяє статистична суміш (Er + R), з переважаючою часткою атомів Er. Тетрарні фази Y(Dy, Er)1,5La(Ce, Pr)1,5SixSe7 (x = 1,66; 1,67 і 1,75) кристалізуються в структурному типі Pr3Si1,25Se7 (ПГ P63). Для встановлення зарядового стану Силіцію проведено квантовохімічні розрахунки

рівноважної просторової будови зарядово-стехіометричних молекулярних моделей змішаного селеносилікату R3Si1,75Se7 (R – 1,5 Y + 1,5 La). Результати квантовохімічних розрахунків вказують на те, що у тетраедрах атом Si(IV) утворює порівняно короткі переважно ковалентні зв'язки, тоді як в октаедрах утворених атомами Si(II) зв'язки більш довгі і мають істотно йонний характер.У системах R2S3 – La2S3 – GeS2 (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er) встановлено існування твердих розчинів R4xLa4-xGe3S12 (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er; x = 0:0,75) на основі La4Ge3S12. Заміщення позиції атомів La атомами R в структурі La4Ge3S12 зменшується в ряду Y □ Tb □ Dy □ Ho □ Er. Вивчена методом монокристалу кристалічна структура окремих тетрарних фаз LaxRyGe3S12 (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er; x = 2–2,64, y = 1,36–2,0): у ПСТ 6(a) переважає вміст атома La, а в позиції 18(b) – R (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er).

2. The thesis is devoted to the study of phase equilibria at 770 K in quasi-ternary systems R2X3 – R'2X3 – PbX (DIVX2) (R, R' – Y, La, Pr, Er; DIV – Si, Ge , Sn; X – S, Se) and the crystal structure of new quaternary phases that form in these systems. Isothermal sections of the phase diagrams of 28 quasi-ternary systems of the R2X3 – R´2X3 – PbX (DIVX2) type (R, R´– Y, La, Pr, Er; DIV – Si, Ge, Sn; X – S, Se) at 770 K were investigated by X-ray phase analysis. The new quaternary phases Er2.34R0.66Ge1.28S7 (R – La, Ce, Pr) crystallize in the Dy3Ge1,25S7 structure type (SG P63). The 6c site of Dy atoms is occupied by the statistical mixture (Er + R), with the predominant fraction of Er atoms. The quaternary phases Y(Dy, Er)1.5La(Ce, Pr)1,5SixSe7 (x = 1.66; 1.67; and 1.75) crystallize in the Pr3Si1.25Se7 structure type (PG P63). Quantum chemical calculations of the equilibrium spatial structure of charge-stoichiometric molecular models of the mixed selenosilicate R3Si1.75Se7 (R – 1.5 Y + 1.5 La) were performed to ascertain the charge state of silicon. The results of quantum chemical calculations indicate that tetrahedrally coordinated Si (IV) atoms form relatively short, mainly covalent bonds, whereas the bonds in the octahedra centered on Si (II) atoms are longer and have substantially ionic character. The existence of solid solution ranges R4xLa4-xGe3S12 (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er; x = 0–0.75) based on La4Ge3S12 was found in the R2S3 – La2S3 – GeS2 systems. The substitution of La atoms in the La4Ge3S12 structure decreases in the series Y □ Tb □ Dy □ Ho □ Er. The crystal structure of several quaternary phases R4xLa4-xGe3S12 (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er; x = 2–2.64, y = 1.36–2.0) was studied by the single crystal method. These structures contain two types of the statistical mixtures of rare earth metals which are described by different ratios of REM at various sites. The content of La atoms is predominant at the 6a site, and of R atoms (R – Y, Tb, Dy, Ho, Er) at the 18b site.

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. Марчук Олег Васильович

2. Marchuk Oleg Vasyl'ovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

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. Котур Богдан Ярославович.
2. Kotur Bogdan

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. Чумак Володимир Валентинович
2. Chumak Vladimir

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 Барчій Ігор Євгенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Барчій Ігор Євгенович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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