Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0523U100018

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-02-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бойчишин Лідія Михайлівна

2. Boichyshyn Lidia M.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 31-01-2023

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 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, буд. 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, буд. 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: 31.15

Тема дисертації:

1. Наноструктурування та його вплив на фізико-хімічні властивості аморфних сплавів на основі алюмінію та заліза

2. Nanostructuring and its influence on the physical and chemical properties of amorphous alloys based on aluminum and iron

Реферат/анотація:

1. У роботі розкрито важливу фундаментальну наукову проблему щодо впливу термічно ініційованих процесів нанокристалізації в аморфних металевих сплавах на основі алюмінію та заліза на їхню атомну структуру, міжфазну морфологію, елементний склад та фізико-хімічні властивості. Зокрема з'ясовано, що вихідні зразки АМС систем Al□РЗМ□Ni/Fe (РЗМ □ Y, Gd та Dy) та Fe□Nb□B□РЗМ (РЗМ □ Y, Gd, Tb та Dy) володіють особливою кластерною структурою і формуються, переважно, з атомів основних елементів, утворюючи гомоатомні пари Al□Al та Fe□Fe. У формуванні ближнього порядку також беруть участь атоми РЗМ та Ni/Fe (у випадку Al-АМС). Міжатомні відстані свідчать про донор-акцепторну електронну взаємодію у парах Al□ПМ, а між атомами Al та РЗМ простежується типовий металічний зв'язок. У випадку АМС на основі заліза можна стверджувати лише взаємодію РЗМ□B. Водночас зменшення відстані Fe□B, порівняно із сумою атомних радіусів елементів, зафіксовано лише у АМС Fe82Nb2B14Dy2, що може бути пов'язано з особливостями структури

кластерів в присутності саме диспрозію. Існування у вихідних Al-AMC трьох основних типів атомних пар у першій координаційній сфері, а саме Al□Al, Al□РЗМ та Al□Ni, утворення нанокристалів Al призводить до розшарування аморфної матриці на дві фази, збагачені РЗМ або Ni, відповідно. Подібний процес не спостерігається у випадку Fe-AMC, причиною чого є наявність великої кількості атомних пар Nb□Nb, які, концентруючись на міжкластерних межах, утворюють під час відпалу дифузійні шари. Аналіз кінетики ізотермічної кристалізації показав, що ріст зерен (нанокристалів) має дифузійно-контрольований характер, а тому ніобієві шари обмежують ріст та запобігають об'єднанню наночастинок. Магнітні ізотерми РЗМ-легованих (Y, Gd, Tb, Dy) AMC системи Fe–Nb–B за температури 2 K у магнітному полі з величиною індукції до 7 Тл, описують феро/феримагнітну поведінку зразків з насиченням нижче 1 Тл. AMC поділяються на дві групи залежно від величини магнітонеоборотного ефекту (MI-ефект). Для сплавів першої групи (Y- та Gd-леговані AMC) характерні відносно низькі значення ступеня магнітної необоротності □ близько 5 % за низьких температур, тоді як у випадку другої групи (сплави леговані Dy та Tb) □ більш ніж 50 % при 2 K. Якщо сплавам Fe82Nb2B14Y2 та Fe82Nb2B14Gd2 характерне високе значення μ (530 та 750, відповідно), то у AMC другої групи додатки РЗМ викликають локальну магнітну анізотропію, яка відповідає за зниження магнітної сприйнятливості майже у п'ять разів. Електрохімічні дослідження показали, що двома важливими факторами, які визначають корозійну тривкість досліджених сплавів систем Al□РЗМ□Ni/Fe та Fe□Nb□B□РЗМ є товщина та щільність (поруватість) захисних оксидно-гідроксидних шарів, які формуються на поверхні зразків AMC під дією електрохімічних навантажень. Так збільшення числа циклів поляризації досліджених AMC-електродів призводить до зменшення струмів окиснення у водних розчинах NaCl та, навпаки, до їх зростання у лужному (KOH) середовищі в результаті потовщення/ущільнення та руйнування захисних шарів, відповідно. При цьому важливу роль відіграють також процеси електрохімічного виділення газів та оборотні редокс-перетворення сполук заліза. AMC-електроди систем Al□РЗМ□Ni/Fe та Fe□Nb□B□РЗМ володіють електрокаталітичними властивостями щодо РВВ з водних лужних розчинів, при цьому ефективність процесу суттєво зростає за використання відпалених зразків. Електрокаталітична активність досліджених зразків AMC зумовлена збільшенням поверхневої концентрації Ni (для Al-AMC) і РЗМ (для Fe-AMC) в результаті електрохімічного окиснення-відновлення поверхні AMC та, відповідно, відпалу. З'ясовано, що найперспективнішими електродними матеріалами для електрохімічного виділення водню з лужних розчинів є відпалені зразки AMC Al87Ni8Y4Dy1 та Fe84Nb2B14Gd2.

2. The work reveals an important fundamental scientific problem regarding the influence of thermally initiated nanocrystallization processes in amorphous metal alloys based on aluminum and iron on their atomic structure, interphase morphology, elemental composition, and physicochemical properties. In particular, it was found that the initial samples of AMA systems Al□RE□Ni/Fe (RE Y, Gd and Dy) and Fe□Nb□B□ RE (RE Y, Gd, Tb and Dy) have a special cluster structure and are formed, mainly, from atoms of basic elements, forming homoatomic pairs Al□Al and Fe□Fe. RE and Ni/Fe atoms (in the case of Al-AMA) also participate in the formation of short-range order. The interatomic distances indicate a donor–acceptor electron interaction in Al□TM pairs, and a typical metallic bond is observed between Al and RE atoms. In the case of iron-based AMA, only the interaction of RE □B can be asserted. At the same time, a decrease in the Fe□B distance, compared to the sum of the atomic radii of the elements, was recorded only in Fe82Nb2B14Dy2 AMA, which may be related to the peculiarities of the cluster structure in the presence of dysprosium itself. The existence of three main types of atomic pairs in the first coordination sphere, namely Al□Al, Al□ RE, and Al□Ni in the starting Al-AMA, the formation of Al nanocrystals leads to the delamination of the amorphous matrix into two phases enriched in RE or Ni, respectively. A similar process is not observed in the case of Fe-AMA, the reason for which is the presence of a large number of Nb□Nb atomic pairs, which, concentrating on intercluster boundaries, form diffusion layers during annealing. The analysis of the kinetics of isothermal crystallization showed that the growth of grains (nanocrystals) has a diffusion-controlled nature, and therefore the niobium layers limit the growth and prevent the aggregation of nanoparticles. Magnetic isotherms of RE-doped (Y, Gd, Tb, Dy) AMAs of the Fe–Nb–B system at a temperature of 2 K in a magnetic field with an induction value of up to 7 T describe the ferro/ferrimagnetic behavior of samples with saturation below 1 T. AMAs are divided into two groups depending on the magnitude of the magnetic reversal effect (MI effect). Alloys of the first group (Y- and Gd-doped

AMAs) are characterized by relatively low values of the degree of magnetic irreversibility - about 5% at low temperatures, while in the case of the second group (alloys doped with Dy and Tb) - more than 50% at 2 K. If the Fe82Nb2B14Y2 and Fe82Nb2B14Gd2 alloys are characterized by a high value of μ (530 and 750, respectively), then in the AMAs of the second group, the RE additions cause local magnetic anisotropy, which is responsible for the decrease in magnetic susceptibility by almost five times. Electrochemical studies have shown that the thickness and density (porosity) of the protective oxide-hydroxide layers that form on the surface of the AMA samples are two important factors that determine the corrosion resistance of the investigated alloys of the Al□RE□Ni/Fe and Fe□Nb□B□RE systems under the action of electrochemical loads. Thus, an increase in the number of polarization cycles of the studied AMA electrodes leads to a decrease in oxidation currents in NaCl aqueous solutions and, conversely, to their growth in an alkaline (KOH) environment as a result of thickening/densification and destruction of protective layers, respectively. At the same time, processes of electrochemical release of gases and reversible red/ox transformations of iron compounds also play an important role. AMA electrodes of the Al□RE□Ni/Fe and Fe□Nb□B□RE systems possess electrocatalytic properties with respect to HER from aqueous alkaline solutions, while the efficiency of the process increases significantly with the use of annealed samples. The electrocatalytic activity of the investigated AMA samples is caused by an increase in the surface concentration of Ni (for Al-AMA) and RE (for Fe-AMA) as a result of electrochemical oxidation-reduction of the AMA surface and, accordingly, annealing. It was found that the most promising electrode materials for the electrochemical release of hydrogen from alkaline solutions are the annealed samples of AMA Al87Ni8Y4Dy1 and Fe84Nb2B14Gd2.

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. Бойчишин Лідія Михайлівна

2. Boichyshyn Lidia M.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бойчишин Лідія Михайлівна

2. Boichyshyn Lidia M.

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. Роїк Олександр Сергійович

2. Roik Oleksandr Serhiyovych

Кваліфікація: д. 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колотілов Сергій Володимирович

2. Kolotilov Serhii V.

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. Завалій Ігор Юліянович

2. Zavalii Ihor Yu.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Павлюк Володимир Васильович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Павлюк Володимир Васильович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.