Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U002790

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-07-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Крачан Тетяна Михайлівна
2. Krachan Tetiana Mykhailivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 03-07-2018

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Подільський державний аграрно-технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 22769675

Місцезнаходження: вулиця Шевченка, 13, Кам'янець-Подільський, Кам'янець-Подільський р-н., Хмельницька обл., 32300, 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, 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, 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:

Тема дисертації:

1. Фазові рівноваги і кристалічна структура сполук у системах Y–{Cu, Ag}–Al, {Y, La}–Ag–Ga та споріднених
2. Phase equilibria and crystal structure of the compounds of the Y–{Cu, Ag}–Al, {Y, La}–Ag–Ga systems and related

Реферат:

1. Проведене нами дослідження продовжує систематичне вивчення взаємодії компонентів у системах Y–{Cu, Ag}–Al, {Y, La}–Ag–Ga та споріднених. Синтез нових сполук та дослідження їхньої будови і фізичних властивостей є перспективним напрямом розвитку сучасної хімічної науки. Виявлення взаємозв'язку між структурою, складом, властивостями нових сполук створює можливість цілеспрямованого пошуку матеріалів із певними техніко-експлуатаційними властивостями. Розшифрування структур нових алюмінідів і ґалідів, які утворюються у вище згаданих системах, дасть змогу глибше вивчити взаємозв'язки між окремими класами інтерметалічних сполук. Теоретичною основою для подібних досліджень є діаграми стану, які відображають взаємодію компонентів у системі. Нами вперше досліджено фазові рівноваги в потрійних системах: Y–Cu–Al при 820 K, Y–Ag–Al при 870 K, Y–Ag–Ga при 670 K, La–Ag–Ga та Ho–Zn–Al при 770 K (всі системи вивчено в області 0–0,50 мол. част. РЗМ) , а також La–Ag–Ga при 570 K (в області 0–0,333 мол. част. La) і побудовано ізотермічні перерізи відповідних діаграм стану. У досліджених системах виявлено 15 нових тернарних сполук, для яких вперше вивчено кристалічну структуру. Підтверджено існування 11

тернарних алюмінідів та ґалідів, уточнено координати атомів та спосіб їхнього розподілу у структурах сполук. Встановлено, що кристалічні структури нових сполук належать до відомих структурних типів. Визначено межі існування твердих розчинів на основі бінарних сполук та областей гомогенності тернарних сполук у досліджених системах. Проведено порівняльний аналіз взаємодії компонентів у споріднених системах РЗМ–{Cu, Ag}–{Al, Ga} та РЗМ–Zn–Al. Більшу спорідненість виявляють системи з Алюмінієм, у яких утворюються сполуки з однотипними структурами. Спільними особливостями діаграм фазових рівноваг систем РЗМ–{Cu, Ag, Zn}–Al є утворення значної кількості тернарних алюмінідів, зосереджених в області концентрацій до 0,333 мол. част. РЗМ та наявність тернарних та бінарних фаз із помітними областями гомогенності, утвореними внаслідок статистичного заміщення атомів меншого розміру ({Cu, Ag}, Al). Особливістю сполук систем РЗМ–Zn–Al є наявність незначних областей гомогенності, порівняно з протяжністю тернарних фаз в разі систем з Купрумом та Аргентумом. Досліджені нами системи з Галієм і Аргентумом вирізняються значно меншою кількістю тернарних сполук, у порівнянні із системами з RE□Cu□Ga та RE□Ag□Al. Проаналізовано особливості кристалічних структур вивчених тернарних сполук та проведено порівняння їхніх структур з іншими структурними типами. Більшість кристалічних структур тернарних сполук досліджених систем належить до класу з ікосаедричною координацією атомів меншого розміру. Встановлено, що атоми d- і p-елементів ({Cu, Ag, Zn} та {Al, Ga}) можуть впорядковано займати певні кристалографічні позиції або утворювати статистичні суміші. Для сполук Y3Cu2Al7 та Y3Ag2Al7 (СТ Ca3Cu2Al7) виявлено повністю упорядковане розташування атомів Арґентуму та Алюмінію у кристалографічних позиціях, що вирізняє структуру цих сполук від усіх інших тернарних інтерметалідів досліджених систем. Деякі сполуки характеризуються частковим заповненням кристалографічних позицій атомами перехідного металу (СТ DyAg2,4Al2,6 та Yb4(Cu0,26Al0,74)33) або РЗМ (СТ Th2Ni17). Проаналізовано міжатомні віддалі у структурах досліджених сполук, які переважно добре узгоджуються із сумами атомних радіусів вихідних компонентів. Найбільше скорочення міжатомних віддалей спостерігалося у структурі сполуки Y4Ag9,92Al22,08Ag0,16 (СТ Yb4(Cu0,26Al0,74)33): □X1-X6 = 0,2429(3) нм, що відповідає скороченню ~15,24 %, кристалографічна позиція 2b (0 0 0) заповнена атомами X6 (16% Ag) частково. Досліджено магнітні властивості окремих сполук. Сполуки Ho6Ag15,33Al14,01 та Ho6Ag16,18Al13,36 є парамагнетиками, які за низьких температур (30 K і нижче) впорядковуються антиферомагнітно. При дослідженні температурної залежності теплоємності для сполуки Ho6Ag15,33Al14,01, відповідного піку не виявлено, що може свідчити про домішкове походження цієї аномалії. Аналіз залежності об'ємів елементарних комірок від радіуса іонів RE3+ для сполук RE4(Al1-xAgx)32Agy (СТ Yb4(Cu0,26Al0,74)33) свідчить про тривалентний стан атомів рідкоземельних металів у структурах досліджених сполук.

2. The performed investigations continue systematic research of the interaction of the components in the ternary Y–{Cu, Ag}–Al, {Y, La}–Ag–Ga systems and related ones. Synthesis of new compounds and investigation of their structure and physical properties are the promising direction of development of modern chemical science. Determination of the relationship between a structure, composition, properties of new compounds creates the possibility of targeted searching of materials with defined technical and exploitation properties. Interpretation of the structures of new aluminides and gallides which are formed in the above-mentioned systems will give the possibility for detailed research of relationships between separate classes of intermetallic compounds in future. The phase diagrams, which reflect the interaction of components in the systems, are the theoretical basis for such researches. Interaction of the components in the ternary systems Y–Cu–Al at 820 K, Y–Ag–Al at 870 K, Y–Ag–Ga at 670 K, La–Ag–Ga and Ho–Zn–Al at 770 K (region up to 0–0,50 mol. part. RE), and La–Ag–Ga at 570 K (region up to 0–0,333 mol. part. La) have been investigated for the first time by means of X-Ray phase and structural analysis. Isothermal sections of the phase equilibria diagrams of these systems have been constructed. Crystal structures for 15 new compounds have been determined by using single crystal X-Ray and powder diffraction data. The existence of 11 earlier known compounds has been confirmed in these systems. Atomic coordinates, their displacement parameters and mode of their distribution in the crystallographic sites have been established. Crystal structures of the investigated compounds belong to the known structure types.The limit compositions of the solid solutions based on the binary compounds and homogeneity ranges for ternary ones were determined in the

investigated systems. A comparative analysis of the interaction of components in related systems RE–{Cu, Ag}–{Al, Ga} and RE–Zn–Al was carried out. Aluminum containing systems have more common features, and the ternary compounds of the same structure types are formed. Common peculiarities of the phase equilibria diagrams of the RE–{Cu, Ag, Zn}–Al systems are the formation of a significant number of ternary aluminides, concentrated in the region up to 0.333 mol. part RE, and existence of the ternary and binary phases with significant of homogeneity regions, formed as a result of statistical distribution by the smaller atoms ({Cu, Ag}, Al) in the crystallographic positions. The peculiarity of the ternary RE-Zn-Al compounds is formation of somewhat substantially smaller homogeneity regions compared to the ternary phases in the Cu or Ag containing systems. The investigated systems containing rare earths metals, gallium and silver are distinguished by a significant smaller number of the ternary compounds, compared with the RE□Cu□Ga and RE□Ag□Al systems. The peculiarities of the crystal structures of the studied ternary compounds were analyzed and a comparison of their structures with other structural types was performed. Most crystal structures of the ternary compounds in these systems belong to the class of structure with icosahedral coordination of smaller atoms. It was found that the atoms of d- and p-elements ({Cu,Ag,Zn} and {Al,Ga}) can fully occupied certain crystallographic positions or form statistical mixtures among themselves. For the compounds Y3Cu2Al7 and Y3Ag2Al7 (Ca3Cu2Al7 type structure) completely ordered arrangement of all atom types in the crystallographic positions was revealed, which distinguishes the structure of these compounds from all other ternary phases of the studied systems. Some crystal structures of the compounds are characterized by partial occupation of crystallographic positions by the atoms of transition (DyAg2.4Al2.6, Yb4(Cu0,26Al0,74)33 type structures) or rare earths elements (Th2Ni17 type structure). The interatomic distances in the structures of investigated compounds mainly are in good agreement with the sum of the atomic radii of respective components. The greatest shortening of interatomic distances was observed in the structure of the compound Y4Ag9,92Al22,08Ag0,16 (CT Yb4(Cu0,26Al0,74)33): □X1-X6 = 0,2429(3) nm, which corresponds to the shortening ~15,24 %, crystallographic position 2b (0 0 0) is partly occupied by the X6 (16% Ag) atoms. The investigation of the temperature dependence of magnetic susceptibility revealed that Ho6Ag15.33Al14.01 and Ho6Ag16.18Al13.36 compounds are paramagnets with antiferromagnetic ordering below 30 K. Analysis of the dependence of the cell volumes on the radius of RE3+ ions for the RE4(Al1-xAgx)32Agy (ST Yb4(Cu0,26Al0,74)33) compounds also indicates the same trivalent state of the RE atoms in the investigated phases.

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)

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

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.