Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0505U000255

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-05-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Василечко Леонід Орестович
2. Vasylechko Leonid Orestovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 13-04-2005

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: 79013, Україна, м.Львів, вул. С.Бандери, 12

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: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: 79013, Україна, м.Львів, вул. С.Бандери, 12

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.15, 31.15.17

Тема дисертації:

1. Кристалохімія та фазові перетворення складних оксидів рідкісноземельних елементів зі структурою перовскиту.

2. Crystal chemistry and phase transitions in complex oxides of rare earth elements with perovskite structure.

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена кристалохімічному аналізу та вивченню умов існування алюмінатів та галатів РЗЕ із перовскитними та перовскитоподібними структурами, твердих розчинів на їх основі, а також твердих розчинів титанатів-хромітів лантану та кальцію в широкому діапазоні температур 12-1300 К, встановленню взаємозв'язку між особливостями кристалічних структур, характером фазових перетворень та деякими фізичними властивостями цих сполук. Синтезовано та встановлено кристалічні структури понад 160 зразків сполук та твердих розчинів, що належать до 14 різних типів перовскитних структур. Виявлено існування дванадцяти температурно- та концентраційно-індукованих фазових перетворень різних типів. Побудовано фазові діаграми псевдобінарних систем CeAlO3-RAlO3 (R=La, Nd), LaGaO3-RGaO3 (R=Ce, Pr, Nd, Sm), узагальнені діаграми систем RAlO3-R'AlO3 та RGaO3-R'GaO3, а також ізотермічні перерізи квазітернарних систем CaCrO3-CaTiO3-LaCrO3 та La2/3TiO3-CaTiO3-LaCrO3.

2. The thesis is devoted to the crystal chemical analysis and the study of the existance conditions of the rare earth aluminates and gallates with perovskite-like structures, solid solutions based on them, as well as the Lanthanum-Calcium chromites-titanates in a wide temperature range 12-1300 K; establishing of the relationships between the structure peculiarities, nature of the phase transitions and some physical properties of these compounds. Crystal structures, thermal expansion and phase transitions more than 160 samples of the compounds RAlO3, RGaO3, RAAlO4, RAGaO4 (R=P3E, A=Ca, Sr) and solid solutions R1-xR'xAlO3, R1-xR'xGaO3 (R, R'=P3E), La1-xSrxGa1-yMyO3-d (M=Mg, Ti), La1-xCaxCr1-yTiyO3 and La1/3(2-2x+y)CaxTi1-yCryO3 have been investigated by means of in situ high-resolution powder diffraction technique using synchrotron and X-ray radiation, single crystal diffraction and thermal analysis. At room temperature RAlO3 compounds display rhombohedral, space group (S.G.) R-3c (R=La, Pr, Nd), orthorhombic, S.G. Pbnm (R=Sm,Lu, Y) and tetragonal, S.G. I4/mcm (CeAlO3) structures. Six types of the phase transitions exist in RAlO3 compounds and their solid solutions. Continuous phase transition Pm-3m-R-3c is typical for the first members of RAlO3 compounds (R=La, Ce, Pr, Nd), whereas first-order phase transformation R-3c-Pbnm is observed for SmAlO3, GdAlO3 and EuAlO3. The temperatures of both these transitions decrease linearly with the increasing of R3+ cation radii. Four other phase transitions: R-3c-Imma, Imma-I4/mcm, Imma-I2/m and I2/m-I4/mcm have been found in CeAlO3 and Ce1-xRxAlO3 (R=La, Nd) solid solutions. Temperatures of these transitions decrease with the decreasing of Ce concentration in the solid solutions. Structures of RE gallates RGaO3 at room temperature (RT) are orthorhombic; the peculiarity is the different cell parameters ratio ap, bp and cp for LaGaO3, CeGaO3 and other RGaO3 compounds within the same GdFeO3 type of structure. It was established, that R1-xR'xGaO3 solid solutions are formed inRGaO3-R'GaO3 systems. The homogeneity ranges of these solid solutions depend on the difference between ionic radii of R and R' cations, dr: at dr<0.085 A the continuous solid solutions are formed, whereas at dr>0.11 A the homogeneity ranges do not exceed 2-5 at.% R'. First-order phase transition R-3c-Pbnm is typical for LaGaO3, CeGaO3, PrGaO3 and R1-xR'xGaO3 solid solutions with 1.177<r(R3+)<1.216 A. Similar to RE aluminates, the temperatures of this transition decrease with the increasing of R3+ cation radii. Heterovalent substitution of cations in LaGaO3 structure led to appearing of anion-deficient La1-xSrxGaO3-d and La1-xSrxGa1-2xMg2xO3-d compounds with different kind of perovskite structures (S.G. Pbnm, Imma and I2/a, depending on compositions). Five types of concentration- and temperature-induced phase transitions, namely: Pbnm-Imma, Imma-R-3c, Imma-I2/a, I2/a-R3c and R3c-R-3c, are found in these compounds. Thermal expansion of RE aluminates and gallates display nonlinear and anisotropic behaviour. Relative thermal expansion in a- and c-directions are roughly two times higher in comparison with the expansion in b-direction for the compounds with orthorhombic structures. The values of volumetric thermal expansion coefficient for aluminates with orthorhombic and rhobmohedral structures are smaller comparing with isostructural gallates. Negative volume thermal expansion has been discovered in PrGaO3 in the temperature range 12-80 K. In CeAlO3 and solid solutions based on them the negative expansion in c-direction has been detected as well. Based on the results obtained the phase diagrams of the CeAlO3-RAlO3 (R=La, Nd) and LaGaO3-RGaO3 (R=Ce-Sm) pseudobinary systems and the common phase diagrams of RAlO3-R'AlO3 and RGaO3-RGaO3 systems have been constructed. It was showed, that AA'BO4 compounds with the tetragonal K2NiF4 type of structure are formed in the A2O3-A'O-B2O3 (A=RE, A'=Ca, Sr; B=Ga, Al) pseudoternary systems in the range of the cation radii ratio 1.92<rA(A')/rB<2.4. At the values rA(A')/rB<1.92 the orhtorhombically deformed La2CuO4-type structures are observed. It was established, that additional necessary condition for the formation of the AA'BO4 compounds with the K2NiF4 type of structure is the A/A' cation ratio, which should be situated within the limit 0.88<rA/rA'<1.031. Based on the results of X-ray phase and structural investigations the isothermal sections of the phase diagrams of CaTiO3-LaCrO3-CaCrO3 and CaTiO3-LaCrO3-La2/3TiO3 quasi-ternary systems have been constructed. In the CaTiO3-LaCrO3-CaCrO3 system the extended solid solution with the GdFeO3 type of structure and wide homogeneity range, reaching 0.50-0.65 mol. fractions of CaCrO3 is formed. In the La2/3TiO3-CaTiO3-LaCrO3 system five types of La1/3(2-2x+y)CaxTi1-yCryO3 solid solutions with different A-cation deficient structures are formed. Statistical distribution of A-cation vacancies over a points of A-cation lattice is observed in solid solutions with Pbnm, Imma and I4/mcm structures, whereas in Cmmm and P2/m structures an alternationof layers partially and fully occupied with A-cations was found. From the extrapolation of the concentration dependencies of the

lattice parameters of the solid solutions in the La2/3TiO3-LaCrO3 and La2/3TiO3-CaTiO3 systems the values of the lattice parameters of metastable La2/3TiO3 phase were evaluated. Two types of the phase transitions (Pbnm-R-3c and Pbnm-Imma) have been detected among the studied stoichiometric titanates-chromites. Among the A-cation deficient samples four other type of the structural transformations are found: Imma-I4/mcm, I4/mcm-Pm-3m, Cmmm-P4/mmm and P2/m-P4/mmm.

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. Матковський Андрій Орестович
2. Matkovskii Andrii Orestovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

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. Неділько Сергій Андрійович

2. Неділько Сергій Андрійович

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. Гетьман Євген Іванович

2. Гетьман Євген Іванович

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. Каличак Ярослав Михайлович

2. Каличак Ярослав Михайлович

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 Ковальчук Євген Прокопович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Ковальчук Євген Прокопович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.