Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U100447

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-03-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Заремба Назар Васильович

2. Zaremba Nazar Vasylyovych

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: 02-03-2021

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: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Інтерметалічні фази у системах RENiIn–RENiM (RE = La, Ce; M = Al, Ga, Ge) та споріднених до них.

2. Intermetallic phases in RENiIn–RENiM (RE = La, Ce; M = Al, Ga, Ge) systems and related to them.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена вивченню взаємодії компонентів у системах RETIn1-xMx (RE = La, Ce; T = Ni, Cu; M = Al, Ga, Ge) при 873 K. У системах CeNiIn1-xMx (M = Al, Ga) встановлено формування неперервних рядів твердих розчинів із структурою типу ZrNiAl, взаємозаміщення In та Al(Ga) підтверджено уточненням кристалічної структури 3 нових тетрарних сполук. Системи LaNiIn1-xMx (M = Al, Ga), RENiIn1-xGex та RECuIn1-xGax (RE = La, Ce) характеризуються утворенням обмежених твердих розчинів заміщення із структурами вихідних сполук. Досліджено розчинність германію у сполуках REPtIn (RE = La, Ce), встановлено утворення обмежених твердих розчинів заміщення REPt1-0,7Ge0-0,3In, взаємозаміщення атомів платини на германію підтверджено уточненням кристалічної структури сполуки CePt0,87Ge0,13In та проаналізовано характер зміни параметрів елементарної комірки в межах твердих розчинів. Встановлено існування та досліджено кристалічну структуру 10 нових тернарних алюмінідів, 3 з яких: i9-CeNi2,28Al2,72, EuPt2Al3 і EuIr2Al4 є представниками нових структурних типів інтерметалічних сполук. Для сполуки La3Ni4Al2 проведено кристалохімічний аналіз із застосуванням алгоритму Барнігаузена та встановлено взаємозв'язок з

структурним типом AlB2. Сполука o-PrNiAl (СТ CePdAl) є високотемпературною модифікацією сполуки h-PrNiAl (СТ ZrNiAl), а інтерметаліди серії RENi2+xAl3-x (RE = Ce, Pr, Er, Yb) належать до родини похідних структурного типу CaCu5. Для сполук i7-PrNi2,31Al2,69 та i9-PrNi2,09Al2,91 характерний концентраційний поліморфізм. Вперше синтезовано та досліджено кристалічну структуру сполуки еквіатомного складу LaNiGe (СТ LaPtSi, ПГ I41md), впорядкованого варіанта структурного типу □-ThSi2. Встановлено взаємозаміщення ітербію та кальцію у системі Yb1-xCaxNiGe та досліджено кристалічну структуру сполук Yb0,685Ca0,315NiGe (СТ TiNiSi) і Ca0,98Yb0,02NiGe (СТ MnAlGe). Вивчено кристалічну структуру сполуки Ca0,265Yb0,735Ni3Ge2 (власний СТ, ПГ P6/m) та встановлено її структурну спорідненість з ErNi3Ge2 (власний СТ, ПГ P-6). Тернарні індиди REIrIn (RE = La, Pr, Nd) та SmPt2In2 синтезовані вперше та доповнюють ряди ізоструктурних сполук із структурами типів ZrNiAl та CePt2In2, відповідно, YbIrIn є представником структурного типу TiNiSi. Взаємозаміщення ітербію та кальцію підтверджено уточненням структури сполуки Ca0,785Yb0,215NiIn2 (СТ MgCuAl2). Новий тетрарний інтерметалід LaNiIn0,43Ga0,57 (СТ CeCoAl, ПГ C2/m) синтезований у системі LaNiIn1-xGax та проведений його структурний аналіз. Досліджено магнітні та електротранспортні властивості сполук SmPt2In2, LaNiGe та LaNiIn0,5Ga0,5. Квантово-механічні розрахунки електронної структури було проведено для сполук La3Ni4Al2, i9-PrNi2,09Al2,91, i7-PrNi2,31Al2,69, i3-ErNi2,23Al2,77, i3-YbNi2,31Al2,69, EuPt2Al3, EuIr2Al4, LaNiGe, SmPt2In2, LaIrIn та YbIrIn і згідно цих результатів було проаналізовано хімічний зв'язок у них.

2. The thesis is devoted to the study of quasibinary systems for the purpose of solubility of the fourth component in equiatomic compounds, concentration and structural characteristics of solid solutions, crystal chemical features of new ternary and tetrar compounds, measuring physical properties and electronic structure calculations of some of them. The phase composition of alloys were characterized by means of X-ray powder diffraction and scanning electron microscopy with energy dispersive X-ray spectroscopy, the crystal structures of the phases were established by the methods of X-ray structural analysis. According to the results of experimental studies, the solubility limits of the fourth component in the starting compounds, the length and structure of the phase components of solid solutions in quasi-double systems RENiIn1-xAlx (RE = La, Ce), RETIn1-xGax (RE = La, Ce; T = Ni, Cu) and RENiIn1-xGex (RE = La, Ce) at 873 K were determined. In the CeNiIn1-xMx systems (M = Al, Ga) the formation of continuous solid solutions with a structure of the ZrNiAl type was established and the crystal structure of 3 new tetrar compounds was determined. The LaNiIn1-xMx (M = Al, Ga), RENiIn1-xGex and RECuIn1-xGax (RE = La, Ce) systems based on equiatomic compounds are characterized by the formation of twelve limited solid substitution solutions with structures of the types of starting compounds. The solubility of germanium in REPtIn compounds (RE = La, Ce) was investigated, the formation of limited solid solutions of REPt1-0,7Ge0-0,3In composition was established, and the nature of changes of unit cell parameters and atomic parameters in structures was analyzed. For the first time, the crystal structure of 10 ternary aluminides, 6 ternary indides, 4 ternary germanides, and the tetrary compound LaNiIn0,43Ga0,57, four of which i9-CeNi2,28Al2,72, EuPt2Al3, EuIr2Al4, Ca0,265Yb0,735Ni3Ge2 are the first representatives of new structure types of IMC. Measurements of magnetic and electrotransport properties of compounds SmPt2In2, LaNiGe, and LaNiIn0,5Ga0,5 were performed. The compounds LaNiGe and LaNiIn0,5Ga0,5 were found to be typical Pauli paramagnets, and the compound SmPt2In2 shows an antiferromagnetic exchange interaction between the magnetic moments localized on Sm atoms. All investigated compounds are characterized by the metallic nature of electrical conductivity. Quantum mechanical calculations of the electronic structure were performed for compounds La3Ni4Al2, i9-PrNi2,09Al2,91, i7-PrNi2,31Al2,69, i3-YbNi2,31Al2,69, i3-ErNi2,23Al2,77, EuPt2Al3, EuIr2Al4, LaNiGe, SmPt2In2, LaIrIn and YbIrIn. The nature of the interaction of components in the studied systems, its features are discussed, and it is established that the main influence on it is the size of atoms and electronic structure of interchangeable p-elements and structural characteristics of the initial compounds. Topological and crystal chemical analyzes were performed for compounds with the investigated crystal structure and relationships with known structural types were established.

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. Павлюк Володимир Васильвич

2. Павлюк Володимир Васильвич

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Барчій Ігор Євгенович

2. Барчій Ігор Євгенович

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. Гумінілович Руслана Ростиславівна

2. Guminilovych Ruslana R.

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 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.