Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U003195

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-10-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сенчук Олександр Юрійович
2. Senchuk Oleksandr Yuriyovych

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: 03-10-2018

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: 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

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: 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Фазові рівноваги та кристалічна структура сполук у системах {Ce,Gd}–{Ti,Zr}–{Sn,Sb}

2. Phase equilibria and crystal structure of compounds in {Ce,Gd}–{Ti,Zr}–{Sn,Sb} systems

Реферат/анотація:

1. Методами рентгенівського фазового та рентгенівського структурного аналізів, скануючої електронної мікроскопії та локального рентгеноспектрального аналізу встановлено фазові рівноваги у системах {Ce,Gd}-{Ti,Zr}–{Sn,Sb}. Ізотермічні перерізи діаграм стану цих систем при 600°C в повному або частковому концентраційному інтервалі побудовано вперше. Встановлено існування при 600°C 15 нових тернарних сполук. Синтезовано 13 нових станідів і плюмбідів зі структурою типу ZrFe6Ge4 (hR33, R-3m): RTi6Sn4 (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm) та RTi6Pb4 (R = Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu). Визначено кристалічні структури тернарних стибідів Ce2Ti7Sb12 (СТ La2Ti7Sb12, oS56-14, Cmmm) та Gd2Ti11Sb14 (СТ Sm2Ti11Sb14, oP64-10, Pnma), нового стибіду Ce0,08(3)Zr1,92(3)Sb (СТ UGeTe, tI12, I4/mmm), а також бінарного стибіду Gd2Sb5 (СТ Dy2Sb5, mP28, P21/m). У системі Gd-Zr-Sb встановлено існування протяжної області гомогенності фази Gd1-xZr1+xSb (x = 0-0,905(18)) (СТ UGeTe, tI12, I4/mmm) вздовж ізоконцентрати 33,3 ат.% Sb. Встановлено, що системи R-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} характеризуються утворенням невеликої кількості тернарних сполук. Вони утворюються при відносно невеликому вмісті рідкісноземельного металу (≤40 ат.%). Розподіл густини електронних станів

(DOS) у досліджених сполуках свідчить про металічний характер провідності. Аналіз розподілу індикатора локалізованості електрона (ELI) вказує на металічний тип зв'язку для ізоструктурних сполук SmTi6Sn4 та YTi6Pb4 із часткою ковалентного зв'язку між атомами Sn. Для сполуки YZrSb спостерігається частка іонної складової хімічного зв'язку.

2. By means of X-ray diffraction, scanning electron microscopy and energy dispersive X-ray spectroscopy, the phase equilibria in the {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} systems were established. Isothermal sections of the phase diagrams of the systems at 600°C, in the whole or partial concentration ranges, were built for the first time. The existence of 15 new ternary compounds at 600°C has been established. 13 new stannides and plumbides of the ZrFe6Ge4 structure type (Pearson code hR33, space group I4/mmm) were synthesized: RTi6Sn4 (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm) and RTi6Pb4 (R = Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu). The crystal structures of the ternary antimonides Ce2Ti7Sb12 (structure type La2Ti7Sb12, oS56-14, Cmmm) and Gd2Ti11Sb14 (structure type Sm2Ti11Sb14, oP64-10, Pnma), the new antimonide Ce0,08(3)Zr1,92(3)Sb (structure type UGeTe, tI12, I4/mmm), as well as of the binary antimonide Gd2Sb5 (structure type Dy2Sb5, mP28, P21/m), were determined. In the Gd-Zr-Sb system, the existence of an extended23 homogeneity region along the isoconcentrate 33.3 at.% Sb was established for the phase Gd1-xZr1+xSb (x = 0-0.905(18)) (structure type UGeTe, tI12, I4/mmm). It was established that the systems R-{Ti,Zr}-{Sn,Sb} are characterized by the formation of a small number of ternary compounds. They form at relatively low contents of rare-earth metal (≤40 at.%). One of the main differences between the systems with Sn and Sb is the absence of significant solid solubility of the third component in the binary compounds in the systems with Sn, and its presence in the systems with Sb. Among the {Ce,Gd}-{Ti,Zr}-Sb systems, the solid solubility of the third component is higher in the systems with Zr than with Ti, and higher in the systems with Gd than with Ce. The influence of the size factor on the formation of compounds with ZrFe6Ge4-type structures was estimated. It was established that compounds of this structure type (RT6M4) form at the approximate ratio of the atomic radii of the elements r(R) : r(T) : r(M) = 1,2-1,34 : 1-1,03 : 1-1,06. The structures of the ternary stannides and antimonides are layered. In the structures of the Ce2Ti7Sb12 and Gd2Ti11Sb14 compounds, three-dimensional frameworks, formed by the coordination polyhedra of the Ti atoms, are present. A common feature of many of the investigated compounds is an atom arrangement according to the principles of closepacked structures with the corresponding polyhedra (octahedra, cuboctahedra and anticuboctahedra). The density of electronic states (DOS) distribution in the investigated compounds indicates metallic type of conductivity. An analysis of the distribution of the electron localizability indicator (ELI) indicates metallic type of bonding for the isotypic compounds SmTi6Sn4 and YTi6Pb4, with a fraction of covalent bonding between the Sn atoms. For the YZrSb compound, a minor ionic constituent of the chemical bonding was observed.

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. Гладишевський Роман Євгенович

2. Gladyshevskii Roman Yevhenovych

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. Парасюк Олег Васильович

2. Parasiuk Oleg Vasylyovych

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марцинко Олена Едуардівна

2. Martsinko Olena Eduardivna

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 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.