Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U102227

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-12-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ковальчук Ігор Васильович
2. Kovalchuk Ihor Vasyliovych

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: 08-12-2020

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, буд. 5, м. Львів, Львівська обл., 79060, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук 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: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, буд. 5, м. Львів, Львівська обл., 79060, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Нові гідриди стабілізованих інтерметалічних сполук на основі Титану, Цирконію та Гафнію

2. New hydrides of stabilized intermetallic compounds based on Titanium, Zirconium and Hafnium

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена вивченню процесів сорбції-десорбції водню новими та відомими ІМС на основі цирконію, титану та гафнію. Зокрема, вперше досліджено кристалічну структуру ряду дейтеридів на основі оксигенстабілізованих сполук Zr3Fe(Co,Ni)Ox зі структурою типу Re3B; дейтеридів k-фаз Zr9V4SD23 та Hf9Mo4SiD18 зі структурою типу Hf9Mo4B; оксигенмодифікованих п-фаз (Ti,Zr)4Fe2Ox та Hf4Fe2Ox зі структурою типу Ti2Ni (п-Fe3W3C). Вперше показано залежність воденьсорбційної ємності сполук Zr3MOx (M - Fe, Co, Ni) від кількості розчиненого Оксигену, а на прикладі сполук Zr3FeOx встановлено зменшення схильності їх до диспропорціонування зі збільшенням його вмісту. За результатами спільного уточнення кристалічної структури по рентгенівських та нейтронівських дифрактограмах показано, що втілення Гідрогену в структуру сполук Zr3MOx викликає переміщення атомів Оксигену з октаедричних пустот в тетраедричні та тригонально біпірамідальні позиції, а після десорбції дейтерію – атоми Оксигену повертаються у вихідні позиції. За результатами нейтронографічного дослідження дейтеридів

(Ti,Zr)4Fe2OxDy встановлено, що при заміщенні атомів Титану більшими за розмірами атомами Цирконію починається заповнення атомами Гідрогену трикутних граней у структурі сполук. Воднева підґратка всіх досліджених гідридів □ фаз (Ti,Zr)4Fe2Ox та Hf4Fe2Ox є невпорядкованою. Показано, що існування неперервного твердого розчину □ Ti4-xZrxFe2Oy з широкою областю гомогенності по кисню дозволяє цілеспрямовано змінювати воденьсорбційні характеристики від гетерних (□ Zr4Fe2Oy) до таких, що властиві матеріалам □ акумуляторам водню (□ Ti4Fe2Oy). Загалом, вперше синтезовано більше 30-ти нових гідридів (дейтеридів), для яких встановлено кристалічну структуру та проведено аналіз розподілу атомів Дейтерію в металевій ґратці. Вибірково досліджено їх фізико-хімічні властивості, запропо-новано склади нових гетерів та акумуляторів водню на основі встановлених залежностей склад–структура–властивості для досліджених гідридів.

2. The dissertation is devoted to the study of processed sorption-desorption hydrogen by new and known IMC and alloys based on zirconium, titanium and hafnium. In particular, the crystal structure of deuterides of oxygen-stabilized compounds Zr3Fe(Co,Ni)Ox with Re3B type structure; deuterides of k-phase Zr9V4S and Hf9Mo4Si with Hf9Mo4B type structure; deuterides of oxygen-modified □-phases (Ti,Zr)4Fe2Ox and Hf4Fe2Ox with Ti2Ni type structure (□-Fe3W3C) have been investigated. For the first time the dependence of the hydrogen storage capacity of Zr3MOx (M □ Fe, Co, Ni) compounds on the amounts of dissolved oxygen. The oxygen content decreases the ability to disproportionation Zr3FeOx compounds. The results of joint refinement the crystal structure by XRD and NPD patterns show that the incorporation of hydrogen atoms into the structure Zr3MOx (M □ Fe, Co, Ni) compounds causes the movement of oxygen atoms from octahedral interstices to tetrahedral and trigonal bipyramidal interstices. After desorption deuterium the oxygen atoms return to their original interstices. According to the results of neutronographic studies of (Ti,Zr)4Fe2OxDy deuterides, it has been found that when the titanium is replaced by larger zirconium atoms in the structure of the compounds, the hydrogen atoms of the triangular faces begin to fill. The hydrogen lattice of all investigated hydrides □ phases (Ti,Zr)4Fe2Ox and Hf4Fe2Ox is disordered. In addition to the effect on structure and hydrogen sorption capacity of the compounds, oxygen modification allows to influence their physicochemical properties. In particular, the addition of oxygen facilitates the activation of Ti–Fe alloys and reduce the tendency to disproportionation of Ti/Zr–Fe alloys in the process of hydrogen absorption–desorption. The existence of a continuous solid solution □ Ti4-xZrxFe2Oy and wide homogeneity range for oxygen allow to purposefully change the hydrogen absorption characteristics from getters (□ Zr4Fe2Ox) to typical hydrogen storage materials (□ Ti4Fe2Ox). In general, was determined the crystal structure of 20 new hydrides (deuterides) and the distribution of hydrogen atoms in the metal lattice was determined. Selectively investigated their physics and physicochemical properties. On the basis of established dependences composition-structure-properties for the investigated hydrides, are proposed the compositions of new geters and hydrogen accumulators.

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. Завалій Ігор Юліанович

2. Завалій Ігор Юліанович

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. Міліянчук Христина Юріївна

2. Miliyanchuk Khrystyna Yu.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01, 102

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. Василечко Леонід Орестович

2. Vasylechko Leonid Orestovych

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.