Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002495

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-05-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мацелко Оксана Василівна
2. Matselko Oksana V.

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: 15-05-2019

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

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. Системи Al-Ga-Pd, Ga-{Sn,Sb}-Pd: фазові рівноваги, кристалічні структури та каталітичні властивості сполук

2. Systems Al-Ga-Pd, Ga-{Sn,Sb}-Pd: phase equilibria, crystal structures and catalytic properties of the compounds

Реферат/анотація:

1. Інтерметалічні сполуки з їхньою особливою комбінацією кристалічної та електронної структур є ідеальними кандидатами для розробки нових матеріалів для гетерогенного каталізу з покращеними властивостями. Дослідження фазових рівноваг, умов утворення інтерметалічних сполук і твердих розчинів у системах Ga-M-T, особливо Ga-M-Pd, з акцентом на застосуванні в каталізі є актуальним. Методами рентгенівського фазового та рентгенівського структурного аналізів, скануючої електронної мікроскопії та локального рентгеноспектрального аналізу вперше встановлено фазові рівноваги та побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану систем Al-Ga-Pd при 600°C та ≥ 50 ат.% Pd, Ga-Sn-Pd і Ga-Sb-Pd при 500°C у повному концентраційному інтервалі. В системі Al-Ga-Pd виявлено утворення чотирьох неперервних рядів твердих розчинів заміщення між ізоструктурними сполуками: Al1-xGaxPd (структурний тип FeSi), (Al1-xGax)3Pd5 (Rh5Ge3), Al1-xGaxPd2 (Co2Si), (Al1-xGax)2Pd5 (Pd5Ga2), де 0 ≤ x ≤ 1. У системі Ga-Sn-Pd синтезовано один новий тернарний паладид Ga2+x+ySn4-xPd9 (x = 0,72, y = 0,06); його кристалічна структура власного типу

походить від структури типу Ti2Ni. Застосування квантової теорії атомів у молекулах (QTAIM) дозволило оцінити ефективні заряди атомів у сполуці – -0,40 та -0,60 для Pd, +0,70 для Ga/Sn. Знайдено розподіл індикатора локалізації електронів (ELI-D) для Ga2+x+ySn4-xPd9, який дозволив виявити двоцентрові зв'язки Pd-Sn і Pd-Ga, однак вони розподілені ізотропно, що може перешкоджати утворенню окремих активних центрів на поверхні. Для синтезованого твердого розчину Ga1-xSnxPd2 (0 ≤ x ≤ 1; Co2Si) встановлено вплив електронної структури на каталітичні властивості в реакції напівгідрування ацетилену (максимум каталітичної активності при значенні x = 0,28). Метод наближення когерентного потенціалу (CPA) використано для розрахунку електронної структури Ga1-xSnxPd2. Залежність активності матеріалу від центра ваги d-зони Pd показує різкий максимум для найбільш активного матеріалу. У системі Ga-Sb-Pd виявлено три нові тернарні сполуки: гексагональна Ga1-xSbxPd2 з x = 0,5-0,7 (Fe2P) і дві тетрагональні – Ga0,62(3)Sb0,38(3)Pd3 (Pt3Ga), Ga0,61(3)Sb0,39(3)Pd3 (новий структурний тип).

2. Intermetallic compounds with their peculiar combination of crystal and electronic structures are perfect candidates for the development of novel catalytic materials for heterogeneous catalysis with improved properties. Investigation of phase equilibria, conditions of the intermetallic compounds and solid solutions formation in the system Ga-M-T, especially Ga-M-Pd, with emphasis on application in catalysis is relevant. Інтерметалічні сполуки з їхньою особливою комбінацією кристалічної та електронної структур є ідеальними кандидатами для розробки нових матеріалів для гетерогенного каталізу з покращеними властивостями. Дослідження фазових рівноваг, умов утворення інтерметалічних сполук і твердих розчинів у системах Ga-M-T, особливо Ga-M-Pd, з акцентом на застосуванні в каталізі є актуальним. By means of X-ray diffraction, scanning electron microscopy and energy dispersive X-ray spectroscopy, the phase equilibria in the systems Al-Ga-Pd, Ga-Sn-Pd and Ga-Sb-Pd were determined, and isothermal sections of the phase diagrams were constructed for the first time (Al-Ga-Pd at 600°C for ≥ 50 at.% Pd, Ga-Sn-Pd and Ga-Sb-Pd at 500°C in the whole concentration range). In the Al-Ga-Pd system, four continuous solid solutions between isotypic binary compounds were found: Al1-xGaxPd (structure type FeSi), (Al1-xGax)3Pd5 (Rh5Ge3), Al1-xGaxPd2 (Co2Si), and (Al1-xGax)2Pd5 (Pd5Ga2), all with 0 ≤ x ≤ 1. In the Ga-Sn-Pd system, one ternary palladide forms: Ga2+x+ySn4-xPd9 (x = 0.72, y = 0.06 from X-ray diffraction); its crystal structure is derived from the Ti2Ni type. Application of the Quantum Theory of Atoms In Molecules (QTAIM) allowed us to estimate the effective charges of the atoms. The charges obtained for the Pd atoms (-0.40, -0.60) are very close to the values obtained for Pd in GaPd (-0.50), whereas the positive charges for Ga and Sn (+0.70 and +0.85) are slightly higher than for Ga in GaPd. The distribution of the Electron Localizability Indicator (ELI) allowed detecting two-center Pd-Sn and Pd-Ga interactions. In Ga2+x+ySn4-xPd9 these are distributed isotropically, which may interfere with the formation of separate active sites on the surface, thereby reducing the catalytic activity. For the solid solution Ga1-xSnxPd2 (0 ≤ x ≤ 1; Co2Si-type structure), the influence of the electronic structure on the catalytic properties in the reaction of acetylene semi-hydrogenation (maximum catalytic activity at the nominal composition x = 0.28) was studied. The method of Coherent Potential Approximation (CPA) was used to calculate the electronic structure of Ga1-xSnxPd2 from X-ray photoelectron spectroscopy for different values of x around the value for maximum catalytic activity. The dependence of the activity on the center of gravity of the Pd d-band shows a sharp maximum. Three new ternary phases were discovered in the Pd-rich part of the Ga-Sb-Pd system: Ga1-xSbxPd2 (Fe2P-type structure) with x = 0.5-0.7 at 500 °C, and two tetragonal phases: Ga0.62(3)Sb0.38(3)Pd3 (Pt3Ga), Ga0.61(3)Sb0.39(3)Pd3 (own structure type).

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. Гринь Юрій Миколайович

2. Grin Yuriy M.

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. Гладишевський Роман Євгенович

2. Gladyshevskii Roman Ye.

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. Білоус Анатолій Григорович

2. Bilous Anatoly G.

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. Барчій Ігор Євгенович

2. Barchiy Igor E.

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.