Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U000630

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-03-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гвоздецький Володимир Ярославович
2. Gvozdetskyi Volodymyr Yaroslavovych

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: 02-03-2016

Спеціальність за освітою: 8.070301

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

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: 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

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. Синтез, кристалічна структура та магнітні властивості германідів, антимонідів феруму/нікелю з лужно- та рідкісноземельними металами

2. Synthesis, crystal structure and magnetic properties of germanides and antimonides of iron/nickel with alkaline-earth and rare-earth metals

Реферат/анотація:

1. Вперше встановлено вплив Ba на структуру та властивості твердого розчину Sr1-xBaxNi2Ge2 (концентраційний та температурний перехід від тетрагональної до ромбічної структури через модульовану), визначено область існування дефектного антимоніду SrNi2-xSb2, синтезовано низку нових твердих розчинів із структурами типів CeAl2Ga2, Y0,5Co3Ge3, BaNiSn3 та CeMn4Al8, встановлено окремі фазові рівноваги у чотирикомпонентних системах {Ce,Gd,Yb}-Fe-Ge-Sb в області вмісту рідкісноземельного металу ? 33,3 ат.% при 773 K та досліджено магнітні властивості окремих зразків. Виявлено діамагнітний сигнал при 60 K для суміші фаз типів 122 та 113 системи La-Sr-Co-Ge. Розглянуто кристалохімічні особливості родини структурних типів із многогранниками Франка-Каспера та виявлено, що із різних гіпотетичних структур лише одна комбінація із правила Ярмолюка-Крип'якевича реалізується для даного числа ікосаедрів, а також, числа базових фрагментів структур родини утворюють серію, де кожен наступний представник рівний сумі

двох попередніх, відому як послідовність Фібоначчі.

2. 15 new multicomponent solid solutions with stoichiometry 122 were synthesized in different systems {Ca,Sr,Ba}-{La,Ce,Gd,Yb}-{Fe,Co,Ni}-Ge. Their crystal structures are built up from layers of edge-shared deformed [TGe4] tetrahedra (T = Fe, Co, Ni) alternating with nets of alkaline-earth or rare-earth metal atoms. Structural instability was observed for the solid solution Sr1-xBaxNi2Ge2. The tetragonal CeAl2Ga2-type structure (space group I4/mmm) remains stable up to x = 0.5 under ambient conditions. With increasing Ba content, the c-parameter and the volume of the unit cell, as well as the degree of deformation of the [NiGe4] tetrahedra (flattened with the tetrahedron angle ? = 122.63-125.56° with respect to the ideal value of 109.5°) increase. Upon further increasing the Ba content, the degree of deformation of the tetrahedra reaches a critical value and the structure becomes modulated (x = 0.5-0.8). Finally, for x > 0.8 the orthorhombic BaNi2Ge2-type structure (Pnma) is stable under ambient conditions. The structure of this phase, as refined on Sr0.12(2)Ba0.88(2)Ni2Ge2, changes from orthorhombic to tetragonal when it is heated (Pnma [< 568 K] > modulated structure > I4/mmm [> 588 K]).The family of iron-based superconducting pnictides is in part represented by the structure type CeAl2Ga2 (122-type). The transition to the superconducting state in compounds with this structure type usually appears when the composition is close to a “structural instability”. In spite of the structural instability noted for the germanide Sr1-xBaxNi2Ge2,superconductivity was not observed. Electron doping in the compound SrNi2Ge2 (synthesis of the solid solution Sr1-xLaxNi2Ge2), or creation of structural vacancies in the antimonide SrNi2-xSb2 (x = 0.15-0.28) did also not induce superconductivity. Investigation of the magnetic properties indicated paramagnetic behavior for the majority of the samples. Interestingly, the diamagnetic signal observed at 60 K for a mixture of 122-type Sr1-xLaxCo2Ge2 and 113-type La1-xSrxCoGe3, became stronger after heating of the sample in air, which could be connected with superconductivity. Investigation of the magnetic properties of the 113-type phase La1-xSrxCoGe3 (BaNiSn3, I4mm) indicated weak paramagnetism, while the 148-type phase CaFe4Al8 (CeMn4Al8, I4/mmm) exhibits several intrinsic magnetic transitions. At room temperature it is paramagnetic, but orders antiferromagnetically at 170 K, and shows a spin-glass transition, combined with ferromagnetic ordering, or canting of antiferromagnetically ordered spins from their antiparallel directions, at lower temperatures. The phase equilibria in the systems {Ce,Gd,Yb}-Fe-Ge-Sb were studied in the region of 0-33.3 at.% rare-earth metal at 773 K and diagrams were constructed; no quaternary compounds were found. The binary compounds RSb with cubic NaCl-type structures take part in most of the phase equlibria. The existence of many superconducting compounds with Frank-Kasper polyhedra, and the linear relation between the weighted average coordination number and the icosahedron content, known as the Yarmolyuk-Kripyakevich phenomenon, motivated a more detailed analysis of this class of structures. The atoms in these structures are surrounded by P- (16 vertices), Q- (15 vertices), R- (14 vertices), or X-type (12 vertices) Frank-Kasper polyhedra. The structural formulas can be written as (R3X)i(PX2)j(Q2R2X3)k, which represents a combination of the types Cr3Si (space group Pm-3n) – R3X, MgZn2 (P63/mmc) – PX2, and Zr4Al3 (P6/mmm) – Q2R2X3. Considering the Yarmolyuk-Kripyakevich criterion, solutions of the equation N12 = 2•N16 + 7/6•N15 + 1/3•N14, which defines the numbers of different polyhedra, were derived. It was found that, among the different possible combinations obeying the Yarmolyuk-Kripyakevich rule, only one combination has so far been experimentally observed for a particular number of icosahedra. In most cases the simplest combination, with minimal average coordination number and lowest number of fragments (i.e. i + j + k) is preferred. By distributing all known combinations (R3X)i(PX2)j(Q2R2X3)k into groups, and considering the number of different fragments they contain, regularities were derived. The values of i, j and k revealed a series, where every number is the sum of the two preceding ones: 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8 ..., known as Fibonacci sequence. The family was extended by the synthesis of a quaternary stannide Nb4.4V1.5Ni6Sn0.9 (P63/mmc, a = 4.9433(5), c = 17.935(3) A), which represents a new 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. 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. 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. Парасюк Олег Васильович

2. Парасюк Олег Васильович

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.