

12-ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ХН-89П

“Інтерметаліди для анодів літій-іонних та металогідридних батарей”

Номер держресстації: 0111U001089

Науковий керівник: Павлюк В.В.

Термін виконання: 01.2011-12.2012

Під час виконання теми синтезовано нові електродні матеріали на основі сплавів літєвих, магнієвих та цинкових систем. Виявлено 18 нових сполук, для 15 з них встановлено кристалічну структуру, 3 з них є представниками нових структурних типів. Вперше фазові рівноваги частково встановлені у 3 потрібних системах та повністю у системі Er-Fe-Si. Досліджено електрохімічну активність сплавів на основі частини нових сполук. Як анодні матеріали для літєвих хімічних джерел струму випробувано сплави систем Li-B-C, Li-Si-C, Li-Ge-B, Li-Mg-Si та Li-Cu-Sb, досліджено їхню здатність до літування-делітування та зарядно-розрядні характеристики. Для металогідридних джерел струму розроблено електродні матеріали на основі інтерметалідів систем La-Fe-Zn та La-Mg-Ge і сплавів $GdCo_{5-x}M_x$, досліджено їхню здатність до абсорбції-десорбції водню.

ХА-118Ф

“Міжмолекулярна та міжфазна взаємодія у нанорозмірних дисперсіях оксидів металів і бінарних розчинів ПАР-поліелектроліт”

Номер держресстації: 0112U001283

Науковий керівник: Солтис М.М.

Термін виконання: 01.2012-12.2014

На основі концентраційних залежностей рН бінарних розчинів аніонного поліелектроліту – поліметакрилової кислоти і катіонної поверхнево-активної речовини –N-алкіл-1,3-пропілдіаміну встановлено співвідношення між кулонівською і гідрофобними взаємодіями у розвиток асоціативних і агрегативних процесів. Показано, що критерієм визначення переважаючого вкладу типу взаємодії (кулонівської чи гідрофобної) є максимум на залежності різниці рН індивідуальних розчинів N-алкіл-1,3-пропілдіаміну і бінарних розчинів поліметакрилової кислоти та N-алкіл-1,3-пропілдіаміна логарифму добутку їхніх концентрацій.

Досліджено агрегативно-седиментаційну стійкість та полідисперсність водних суспензій діоксиду титану у водних розчинах промислових поверхнево-активних речовин різної природи та в їхніх бінарних розчинах з поліметакриловою кислотою. Встановлено, що за наявності в суспензіях поліелектроліту добавки аніонної та катіонної ПАР практично не впливають на середній радіус частинок, але змінюють їхню полідисперсність, а добавки катіонної ПАР суттєво впливають на весь комплекс показників дисперсності.

ХА-117Ф

“Конструювання гетероциклічних систем на основі реагентів, одержаних з арендіазонієвих солей”

Номер держресстації: 0112U001282

Науковий керівник: Обушак М.Д.

Термін виконання: 01.2012-12.2014

Розроблено методи арилювання піридин-2-онів і хінолін-2-онів. Запропоновано спосіб одержання біфункціональних 1-арилпіразолів з продуктів реакції Яппа-Клінгеманна, досліджено їхні циклізації. Синтезовано нові функціоналізовані арилпіроли та вивчено їхні властивості. Досліджена інтрамолекулярна циклізація інтермедіатів при арилюванні ненасичених сполук арендіазонієвими солями з естерною групою в орто-положенні і одержано 3-заміщені дигідроізокумарини. Розроблено методи синтезу нових органічних азидів з діазосолей та реакціями нуклеофільного заміщення. Досліджено реакції циклоприсєднання арил(гетарил)азидів з метиленактивними сполуками, що дало змогу одержати нові 1,2,3-

триаколи. Показані шляхи застосування у синтезі нових реагентів з бензо[с]ізоксазольним фрагментом.

XH-115Ф

“Хімічний зв'язок в інтерметалідах і споріднених сполуках: електронна густина з рентгенівської дифракції”

Номер держреєстрації: 0112U001280

Науковий керівник: Гладішевський Р.Є.

Термін виконання: 01.2012-12.2014

Синтезовано нові неорганічні сполуки та на основі масивів прецизійних рентгенівських дифракційних даних встановлено їхню реальну кристалічну структуру та проаналізовано хімічні зв'язки: $T_7T'_6B_8$ ($T = Ta, Nb, T' = Ru, Rh, Ir$), $R_2Co_3Al_9$ ($R = Gd, Tb$), $Sm_{0,67}T_2Al_5$ ($T = Pd, Pt$), $Sm_3Al_{8,34}Ga_{2,66}$, $SmAl_{1,00-1,25}Ga_{1,00-0,75}$, $TmCu_{0,09}Si_{1,91}$, $TmCu_{0,05}Si_{1,66}$, $R_4Ir_{13}Ge_9$ ($R = La, Ce, Pr, Nd, Sm$), RIr_3Ge_2 ($R = La, Ce, Pr, Nd, Sm$), $Ca_3Pt_{4+x}Ge_{13-y}$, $Yb_3Pt_4Ge_{13}$, $TmCu_{0,891}Sb_2$. Розшифровано нові структурні типи $TbGa_{2,64}Sn_{0,36}$ ($DyGa_{2,74}Sn_{0,26}$) та $Os_2S_6Se_2Cl_8$. Методом монокристалу визначено співвимірно модульовані структури $EuPt_2Ga_2$ та $YbGa_{6+x}$, композитну модульовану структуру $Dy_{0,64}\{Dy_5[Fe_2C_9]\}$. Вивчено будову та властивості нецентросиметричних надпровідників ATM_3 ($A = Sr, Ba, T = Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, M = Si, Ge$). Досліджено магнітні властивості фази $U_2(Ni_{1-x}Fe_x)_2Sn$ та її гідридів, а також вплив гідрування на структурні перетворення сполуки $UPtSn$. Методом змінно-струмного електрохімічного синтезу добуто монокристали низки π -комплексів $Cu(I)$ і визначено їхню структуру. Проаналізовано розмірний фактор, як критерій утворення фази $M_{14}Cu_{24}O_{41}$. Систематизовано структурні типи неорганічних сполук із тетрагональною сингонією (просторові групи (135) $P4_2/mbc$ – (123) $P4/mmm$).

XA-116Ф

“Вплив Бору та Карбону на структуру, властивості сплавів на основі РЗЕ, d-елементів та їхніх гідридів”

Номер держреєстрації: 0112U001281

Науковий керівник: Котур Б.Я.

Термін виконання: 01.2012-12.2014

Вивчено взаємодію компонентів у трьох потрійних системах $Dy-\{Co, Ni\}-C$ та $La-B-C$ та побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану цих систем при $800^\circ C$. Встановлено кристалічну структуру 10 інтерметалічних сполук систем $Dy-\{Co, Ni\}-C$, $Tb-\{Mn, Fe, Co, Ni\}-C$ та $La-B-C$ та виготовлено експериментальні зразки для проведення гідрування. Досліджено структуру, магнітні та електричні властивості сполук RB_2C , $Tm_4V_3C_4$ та подвійних карбідів лантану. Всі досліджені інтерметаліди мають металічний тип провідності. $Tm_4V_3C_4$ стає антиферромагнетиком при $T_N = 3 K$, а при $B > 0,1 T$ проходить метамагнітне фазове перетворення. Методом монокристала визначено кристалічні структури сполук: $Dy(Co_{1-x}Ni_x)_2$ для складу $Dy(Co_{0,5}Ni_{0,5})_2$ (структурний тип $CeNiC_2$) та Dy_2Ni_7 (структурний тип $\beta-Gd_2Co_7$).

XA-114Ф

“Синтез, кристалічна структура, властивості нових сполук і фазові рівноваги в металічних системах”

Номер держреєстрації: 0112U001279

Науковий керівник: Гладішевський Р.Є.

Термін виконання: 01.2012-12.2014

Електродуговою та індукційною плавкою синтезовано сплави рідкісноземельних і перехідних металів та p -елементів. Методом рентгенівського фазового аналізу встановлено фазові рівноваги у 17 системах: $La-Fe-Zn$, $Ca-Ti-Ga$, $\{La, Gd, Er\}-Cu-Ga$, $\{Tb, Dy\}-Ag-In$, $\{Y, Pr\}-Ag-Si$, $Hf-Ga-\{Si, Sn\}$, $GdCu_2-GdGa_2-GdSi_2$, $GdGe_2-RGe_2$ ($R = Ho, Lu$), $V-Fe-Sb$, $Gd-Fe-\{Ga, Ge\}-Sb$. В окремих споріднених системах визначено концентраційні межі існування

твердих розчинів. Методами рентгенівського структурного аналізу визначено кристалічну структуру 37 неорганічних сполук і класифіковано їх за координацією атомів *p*-елементів: тетраедрична ($VFeSb$, $Gd_{0,9}Ce_{0,1}(PO_3)_3$), октаедрична ($MgAl_2Ge_2$), тригонально-призматична (Zr_3Si_2 , $Gd_{0,47}Lu_{0,53}Ge_{1,85}$, $Dy_{0,67}Tm_{0,33}Ge_{1,85}$, $GdFe_{0,52}Ge_2$, Hf_2GaSb_3 , $Er_3TAl_3Ge_2$ ($T = Mn, Cu$)), тетрагонально-антипризматична (Pr_5Si_3 , $La_5In_{0,71}Si_{2,29}$, Tb_5Pd_2In , $GdFe_2Ge_2$, $Hf_5Ga_{1,24-0,52}Sn_{1,76-2,48}$, $Hf_5Ga_{1,5}Sb_{1,5}$), тетрагонально-призматична ($Dy_6Fe_{1,72}In$, $Eu_5Au_{17,7}In_{4,3}$, $R_3Ni_7Al_{14}$ ($R = Y, Dy$), Gd_2Cu_2In , Eu_2T_2In ($T = Pd, Pt$)), ікосаедрична ($R_{0,67}Ni_2Al_6$ ($R = Sc, Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$), $La_{20}Pd_{39,57}In_{63}$, $NdNi_{8,8}Si_{4,2}$, Hf_5GaSb_3), кубооктаедрична ($Er_3Cu_{4,8}Ga_{6,2}$). Досліджено електричні та магнітні властивості сполук $R_{0,67}Ni_2Al_6$ ($R = Tb, Er, Tm, Yb, Lu$) і $EuPdGe_3$, магнітні властивості сполуки $NdNi_{8,8}Si_{4,2}$ і твердих розчинів систем $R-Ag-Al-Ge$ ($R = Ce, Pr, Nd$). Систематизовано відомі на сьогодні неорганічні фази складних багатокомпонентних систем.

XH-88П

“Оптимізація електрофізичних і магнітних властивостей твердих розчинів у металічних системах”

Номер держресстації: 0111U001088

Науковий керівник: Стадник Ю.В.

Термін виконання: 01.2011-12.2012

Побудовані ізотермічні перерізи діаграм стану 13 потрійних систем в повному концентраційному інтервалі ($Ti-Ni-Sb$, $Ti-Ni-Sn$, $Gd-Ag-Sn$, $V-Fe-Sb$, $Y-Ni-Sn$, $Zr-Ag-Sn$, $Hf-Ag-Sn$, $Gd-V-Sn$, $Er-V-Sn$, $Er-Mn-Ge$, $Y-Mn-Sn$, $Dy-Mn-Sn$, $Lu-Ni-Sn$) при різних температурах. Вивчено кристалічну структуру 58 інтерметалідів, що утворюються в цих системах, для деяких з них досліджено фізичні властивості. Досліджено кристалічну та електронну структури, електрофізичні та магнітні властивості твердих розчинів заміщення структурного типу $MgAgAs$: $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$, $HfNi_{1-x}Co_xSn$, $HfNi_{1-x}Rh_xSn$, $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$, $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$, $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$, $ZrNi_{1+x}Ni_xSn$, $TiNi_{1+x}Ni_xSn$, $Ti_{1-x}V_xNiSn$. Представлено електронно-валентну схему та механізм утворення сполук зі структурою типу $MgAgAs$, виходячи із симетрії та електронної конфігурації валентних орбіталей вихідних компонентів. Узагальнено закономірності утворення твердих розчинів заміщення та вплив природи замісника на характер розчинності.

XA-113Ф

“Фізико-хімічний аналіз систем рідкісноземельний метал - перехідний метал - *p*-елемент III, V груп: синтез, структура та властивості сполук”

Номер держресстації: 0112U001278

Наукові керівники: Каличак Я.М., Орищин С.В.

Термін виконання: 01.2012-12.2014

Методами рентгенівського фазового, структурного та енергодисперсійного спектрального (ЕДРС) аналізів вперше побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану чотирьох потрійних систем: $Zr-Ti-P$ (1070 K), $Zr-Nb-P$ (1070 K), $Tb-Ag-In$ та $Dy-Ag-In$ (обидві при 870 K). У цих та деяких споріднених системах вперше синтезовано 20 нових тернарних сполук, кристалічну структуру яких вивчено методами монокристала або порошку, також уточнено параметри атомів у структурах низки раніше відомих тернарних та бінарних сполук. Кристалічна структура нової орторомбічної модифікації $o-La_2Ni_2In$ належить до власного структурного типу. Визначено межі областей гомогенності для деяких тернарних фаз та граничні склади твердих розчинів на основі бінарних сполук.

Проведено поміри магнітних властивостей сполук $RE_2Ni_{1,78}In$ ($RE = Gd, Tb, Dy, Ho, Er$), $RE_{11}Ge_4In_6$ ($RE = Tb, Ho, Er$) та $RE_{11}Si_4In_6$ ($RE = Tb, Dy$). За низьких температур сполуки $RE_2Ni_{1,78}In$ та $Tb_{11}T_4In_6$ ($T = Si, Ge$) є антиферромагнетиками, а для решти сполук характерний складний характер магнітного упорядкування. Для сполуки $Dy_{11}Si_4In_6$ виявлено значний магнетокалоричний ефект. Детально вивчено кристалічну та магнітну структуру сполуки $Er_5Ni_2In_4$.

ХА-63Ф

“Методи пробопідготовки та аналізу із застосуванням природних адсорбентів вітчизняних родовищ”

Номер держреєстрації: 0110U001370

Науковий керівник: Каличак Я.М.

Термін виконання: 01.2010-12.2012

Вивчені умови концентрування Sr(II) з водних розчинів за допомогою цеолітів. Показано, що закарпатський клиноптилоліт може бути використаний для підготовки проб води до аналізу, як фільтр для вод, які містять слідові кількості Sr, зокрема ізотопу Sr-90.

Здатність природних цеолітів адсорбувати як низькі (нанogramові), так і високі концентрації речовин, їх висока адсорбційна ємність і селективність, стійкість до середовищ, можливість регенерації і модифікації, дешевизна, доступність – це фактори, які сприяють використанню їх як сорбентів в твердофазовій екстракції.

На основі композицій “РЗЕ–азобарвники” розроблені вольтамперометричні методики визначення Sc ($C_n = 10^{-7} - 10^{-6}$ моль/л). Розроблено методики СФ визначення Cr(III) в присутності Cr(VI) за допомогою ксиленолового оранжевого ($C_n = 7 \cdot 10^{-7} - 1,6 \cdot 10^{-6}$ моль/л). Розроблені методики успішно апробовані під час аналізу кристалофосфорів, технологічних розчинів, питної води, інтерметалічних сплавів, ґрунту, руд, рослинної сировини, біологічних тканин, відпрацьованих каталізаторів, лікарських засобів.

Оскільки в попередніх дослідженнях виявлено, що сполуки Os(IV) з морином, кверцетином і лютеоліном мають кращі спектрофотометричні характеристики в порівнянні із сполукою Os(IV) з рутином, тому основні завдання були частково відкориговані. Зокрема, в рамках звітної теми замість спектрофотометричної методики визначення рутину була розроблена спектрофотометрична методика визначення лютеоліну.