

## РІШЕННЯ ЩОДО ПРИСУДЖЕННЯ НАУКОВОГО СТУПЕНЯ КАНДИДАТА НАУК

Спеціалізована вчена рада Д 35.051.10 Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України (м. Львів) прийняла рішення щодо присудження наукового ступеня кандидата хімічних наук Климентій Настасії Олегівні на підставі прилюдного захисту дисертації “Системи {Sc,Ti,V}-Cu-Al: фазові рівноваги, кристалічні структури, механічні та електричні властивості” у вигляді рукопису за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія 12 лютого 2020 року, протокол № 1/3.

Климентій Настасія Олегівна, 1993 року народження, громадянка України, освіта вища: закінчила магістратуру Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України у 2016 році за спеціальністю “Хімія”.

У 2018 році закінчила аспірантуру Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України.

Працює на посаді молодшого наукового співробітника кафедри неорганічної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України з листопада 2018 року до теперішнього часу.

Дисертація виконана у Львівському національному університеті імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України.

**Науковий керівник:** Гладишевський Роман Євгенович, член-кореспондент НАН України, доктор хімічних наук, професор, проректор з наукової роботи Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України.

Здобувач має 11 опублікованих праць за темою дисертації, з них 0 праць написаних без співавторів, 0 монографій, 2 статті в наукових фахових виданнях України, 3 статті у виданнях, що включені до міжнародних наукометричних баз, 0 авторських свідоцтв на винаходи, 0 патентів України, в тому числі:

1. Klymentiy N. Crystal structure of the ternary compound  $\text{Sc}_6\text{Cu}_{24.1}\text{Al}_{11.9}$  / N. Klymentiy, N. Semuso, S. Pukas, Ya. Tokaychuk, L. Akselrud, R. Gladyshevskii // Solid State Phenom. – 2016. – Vol. 257. – P. 26-29.

2. Klymentiy N. Crystal structure of the ternary compound  $\text{Sc}_3\text{Cu}_{7.5}\text{Al}_{7.5}$  / N. Klymentiy, N. Semuso, S. Pukas, Ya. Tokaychuk, L. Akselrud, R. Gladyshevskii // Chem. Met. Alloys. – 2016. – Vol. 9. – P. 78-83.

3. Klymentiy N. The ternary systems  $\{\text{Sc},\text{Ti}\}$ -Cu-Al at  $800^\circ\text{C}$  / N. Klymentiy, S. Pukas, B. Kuzhel, R. Gladyshevskii // Solid State Phenom. – 2019. – Vol. 289. – P. 28-34.

### **Офіційні опоненти:**

Доктор хімічних наук, професор, вчений секретар, завідувач відділу хімії напівпровідників Інституту фізики напівпровідників імені Лашкарьова НАН України, **Томашик Василь Миколайович** дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. В назві дисертаційної роботи доцільно було написати не “механічні властивості сполук”, а “мікротвердість сполук”, оскільки інші механічні властивості отриманих автором сполук не досліджувалися.

2. На деяких термограмах зразків (рис. 3.12, 3.15, 3.16) практично немає термічних ефектів, тому навряд чи доцільно було наводити їх в дисертації. Не зовсім зрозуміло, чому  $\text{ScCuAl}$  плавиться при  $938,9^\circ\text{C}$ , а кристалізується при  $947,5^\circ\text{C}$  (зазвичай буває навпаки, як це спостерігається в роботі для інших зразків). Крім того, навряд чи можна назвати хорошим узгодженням (с. 112) визначену автором температуру плавлення сполуки  $\text{TiCu}_{0,72}\text{Al}_{1,28}$  ( $1251,3^\circ\text{C}$ ) з літературними даними ( $1200^\circ\text{C}$ ).

3. В сучасній науковій літературі поліморфні модифікації сполук позначаються, як правило, літерами грецького алфавіту, а не так як їх позначає автор дисертації:  $\text{TiCu}_2$  ht,  $\text{Ti}_2\text{Cu}_3$  rt. Вже краще було позначити їх як НТ-  $\text{TiCu}_2$  та ВТ-  $\text{Ti}_2\text{Cu}_3$ , а то не зразу зрозуміло, для чого стоять дві літери після назви сполуки.

4. В тексті дисертаційної роботи (сс. 3, 25, 69, 84, 104-110, 115-117, 122-127 та 143 – всього 63 рази) використовуються по дві круглі дужки підряд, останню з яких варто було замінити квадратною, ізотермічні перерізи в літературному огляді не дуже хорошої якості, а українською мовою необхідно писати “диференційно-термічний” а не “диференціально-термічний” аналіз.

Кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та технології Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки, м. Луцьк – **Піскач Людмила Василівна дала позитивний відгук із зауваженнями:**

1. Не зовсім вдало сформульовано об’єкт дослідження. Об’єктом виступають системи, а взаємодія компонентів у них – це вже предмет дослідження.

2. На деяких діаграмах (напр. рис. 1.3, 1.4) і в тексті (напр. стор. 15) тверді розчини на основі бінарних сполук наведені їх стехіометричними складами, а тверді розчини на основі вихідних компонентів представлені сполуками в круглих дужках.

3. Якість рис. 1.3 не дозволяє побачити сполуку  $\text{Cu}_2\text{Ti}$ , хоча вона існує у інтервалі  $875\text{-}890^\circ\text{C}$ .

4. При температурі  $875^\circ\text{C}$  на стор. 15 до рис. 1.3 записані два нон варіантні перетворення. Одне із них – евтектичний розпад  $L \rightarrow \text{TiCu}_4 + \text{Ti}_2\text{Cu}$ , а інше – твердо фазне утворення сполуки  $\text{Ti}_2\text{Cu}_3$ :  $\text{TiCu}_2 \text{ ht} + \text{Ti}_3\text{Cu}_4 \rightarrow \text{Ti}_2\text{Cu}_3$ . Чи таке можливо?

5. Формули сполук (особливо індекси) на всіх подвійних діаграмах та ізотермічних перерізах потрійних систем представлені дуже малим шрифтом – з діаграми прочитати неможливо.

6. Рис. 3.1 (Фазовий склад сплавів системи Sc-Cu-Al) та 3.2 (Ізотермічний переріз діаграми стану системи Sc-Cu-Al при  $800^\circ\text{C}$ ) мали б надавати однотипну інформацію. Але зразок  $\text{Sc}_{7,7}\text{Cu}_{30,8}\text{Al}_{61,5}$  є імовірно двофазним і містить фазу 1 та Al (чи навіть трифазним:  $\text{Al} + 1 + \text{ScAl}_3$ ), а не фазу 1 та  $\text{ScAl}_3$ , як вказано в тексті роботи. Також на рис. 3.1 зразки по перерізу, що представляє НРТР ( $\text{ScCu}_{1-x}\text{Al}_x$ ), показані як три-, дво- і однофазні.

7. Не можна однозначно стверджувати, що термограми окремих зразків відповідають певним температурам плавлення (чи кристалізації) конкретних сполук, хоча розміщені і близько до них (особливо на рис. 3.12, 3.15, 3.16, 3.36).

8. Не вказано, за рахунок яких процесів, враховуючи літературні та експериментальні дані, із пониженням температури у системах {Sc, Ti}-Cu-Al змінюються склади тернарних фаз та рівноваги.

### **На автореферат та дисертацію надійшло 11 відгуків**

1. Відгук за підписом завідувача кафедри неорганічної хімії та хімічної екології Одеського національного університету імені І.І. Мечникова, д.х.н., професора Ракитської Т.Л. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

*1. В розділі «Наукова новизна одержаних результатів» деякі формулювання не відображають сутність новизни. Наприклад, «Здійснено вимірювання питомого електроопору для семи тернарних алюмінідів»; «...здійснено вимірювання механічних властивостей»; «...встановлено особливості взаємодії компонентів...».*

*2. До фотографій поверхні шліфів зразків (рис. 2, рис. 9, рис. 12), очевидно, необхідний хоча б коротенький коментар.*

*3. Зауваження, щодо оформлення рис. 7.*

2. Відгук за підписом завідувача відділу «Електрохімії та технології неорганічних матеріалів» Інституту загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, д.х.н., чл.-кор. НАН України Омельчука А.О. та старшого наукового співробітника згаданого відділу, к.х.н., Погоренка Ю.В. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

*1. Чи мають перспективу практичного використання синтезовані алюмініди і де їх можна застосовувати?*

*2. На стор. 2 та 5 наведено різні записи сполук  $ScCu_{4,88}Al_{7,12}$ - $ScCu_{5,97}Al_{6,03}$  та  $ScCu_{4,88-5,97}Al_{7,12-6,03}$  відповідно. Незрозуміло, чому дисертант одночасно використовує різні записи для одного й того самого зразку. Чи доцільно називати сполуками об'єкти з таким записом, адже вказуються*

концентраційні межі для хімічних елементів? Можливо мається на увазі утворення ряду твердих розчинів із подібними кристалохімічними характеристиками.

3. Згідно автореферату на стор. 3 вказано, що «у першому розділі здійснено аналіз літературних відомостей про споріднені потрійні системи  $R-Cu-Al$  ( $R = Sc, Y, La-Lu$ ) та  $T-Cu-Al$  ( $T = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta$ ). Приведено ізотермічні перерізи діаграм стану потрійних систем  $Sc-Cu-Al$ ,  $Ti-Cu-Al$  та  $V-Cu-Al$  при різних температурах». Неясно, чим обумовлена необхідність виконання даної роботи і в чому відміна отриманих результатів?

4. Чому за змістом не співпадають твердження дисертанта про не лінійність характеру температурних залежностей досліджених зразків у тексті (зразок  $Sc_3Cu_{7,49}Al_{7,51}$  стор. 10), а у підпису до рис. 7 (зразок складу  $ScCuAl$  (7e), стор. 10).

5. На підставі чого на стор. 12 автор зазначає склади лише трьох інтерметалідів, а приводить по чотири значення температур плавлення та кристалізації?

3. Відгук за підписом завідувача відділу хімії функціональних неорганічних матеріалів Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України, д.х.н., професора Зінченка В.Ф. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. Для порівняння властивостей різних фаз автор застосовує металічні радіуси елементів, що не є цілком коректним у випадку інтерметалідів з високою часткою йонного зв'язку, зокрема, у системах на основі  $Sc$ .

2. Рис. 3 й 7 є надто мілкими, що обмежує сприйняття представлених на них даних.

3. Назви елементів українською й англійською мовами мають позначатися з великої літери.

4. Відгук за підписом завідувача кафедри фізичної, аналітичної та загальної хімії Національного університету “Львівська політехніка”, д.х.н., професора Шаповала П.Й. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. Чи встановлювали ви склад світлої фази на рис. 12 а?

2. Автор в тексті автореферату використовує різні одиниці вимірювання для температури: °С (наприклад в об'єкті досліджень) та К (рис. 7).

3. На ст. 18 наприкінці другого абзацу у хімічній формулі інтерметалічної сполуки відсутній символ одного хімічного елемента.

4. Погана чіткість деяких рисунків та підписів до них (наприклад рис. 3; 7, 11) ускладнює сприйняття інформації.

5. Відгук за підписом завідувача відділу хімії твердого тіла Інституту загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України, д.х.н., професора, академіка НАН України Білоуса А.Г. та старшого наукового співробітника згаданого відділу, к.х.н., Шлапа Ю.Ю. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. В авторефераті наведено SEM зображення зразків (рис. 2 та рис. 9), однак з тексту не зрозуміло, що впливає на морфологію їх поверхні?

2. Автореферат децю перевантажений великою кількістю ілюстративного матеріалу, а малий розмір рисунків ускладнює їх сприйняття.

6. Відгук за підписом провідного наукового співробітника Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України, д.х.н., старшого наукового співробітника Буланової М.В. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. Фотографії мікроструктур дуже дрібні, що не дозволяє бачити деталі. Фази можуть бути підписані а мікрофотографіях, а не у підписах до рисунків.

2. В мікроструктурі, поданій на рис. 9 а чітко спостерігаються три фази, тоді як у підписах до рисунку показано лише дві. Те саме стосується рис. 9 в.

3. В яких координатах проводили запис кривих ДТА? В яких тиглях? Підпис на осі ординат (рис. 3) не читається, так само, як і таблички на рисунку. Доречно було б на рисунках навести температуру термічних ефектів.

4. В авторефераті не вказано, при яких навантаженнях вимірювали мікротвердість фаз. Це важливо, адже часто впливає на значення мікротвердості.

7. Відгук за підписом завідувача кафедри неорганічної хімії ДВНЗ “Ужгородський національний університет”, д.х.н., професора Барчія І.Є. Відгук позитивний з таким зауваженням:

1. Децю не зовсім коректно автором в розділах «Наукова новизна», «Висновки» вказується на тернарні сполуки  $TiCu_{0,30}Al_{2,70}$ - $TiCu_{0,60}Al_{2,40}$ ,  $TiCu_2Al$ - $TiCu_{2,52}Al_{0,48}$  та  $TiCu_{0,54}Al_{1,46}$ - $TiCu_{1,14}Al_{0,86}$ . На мою думку такий запис характерний для представлення меж існування твердих розчинів на основі тернарних сполук змінного складу, як це представлено на стор. 11 автореферату при описі системи Ti-Cu-Al та рис. 8.

8. Відгук за підписом чл.-кор. НАН України, д.х.н., професора ІЗХН ім. Вернадського НАН України Пехньо В.І. та наукового співробітника згаданого інституту, к.х.н. Ковалю Л.І. Відгук позитивний без зауважень.

9. Відгук за підписом завідувача кафедри загальної хімії та полімерів Одеського національного університету імені І.І. Мечников, заслуженого діяча науки і техніки України, д.х.н., професора Сайфулліної І.Й. та професора згаданої кафедри, д.х.н., професора Марцинко О.Е. Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. Які саме особливості кристалічної структури сполук  $Sc_6Cu_{24,1}Al_{11,9}$  та  $Sc_3Cu_{7,49}Al_{7,51}$  (стор. 10) визначають високі значення питомого електроопору?

2. Не зрозуміло, що здобувач мав на увазі під «природою 3d – металу», з якою пов’язується зменшення кількості тернарних сполук у системах Sc-Cu-Al, Ti-Cu-Al та V-Cu-Al при  $800^\circ C$  при переході  $Sc \rightarrow Ti \rightarrow V$  (стор. 15).

10. Відгук за підписом завідувача кафедри фізичної хімії ДВНЗ “Український державний хіміко-технологічний університет”, д.х.н., професора Веліченка О.Б. та професора згаданої кафедри, д.х.н., професора Лук’яненка Т.В. Відгук позитивний з таким зауваженням:

*В якості недоліку слід вказати на відсутність обговорення особливостей кристалічної структури сполук для яких спостерігались високі значення питомого електроопору (сторінка 10 автореферату). Можливо, таке обговорення відсутнє в авторефераті і наявне в дисертації.*

11. Відгук за підписом професора кафедри теорії металургійних процесів та хімії Національної металургійної академії України, д.т.н., професора Камкіної Л.В. та доцента згаданої кафедри, к.х.н., доцента Ісаєвої Л.Є. Відгук позитивний з таким зауваженням:

*Поряд із безумовними досягненнями у роботі, як це можливо судити з автореферату, слід зазначити, що за результатами досліджень доречно було додати до висновків роботи міркування з прикладу, чому в системі Ti-Cu-Al при 800°C відсутні тернарні сполуки і існують протяжні тверді розчини заміщення на основі бінарних сполук –  $VAl_3$ ,  $V_5Al_8$ ,  $Cu_{1,7}Al$  та  $Cu_9Al_4$ . Навіть в основі самої назви “бінарна” або “тернарна” модель, до яких належать досліджувані сполуки, лежить уявлення про суміщення суперечливих структур. Тернарні або чотирикомпонентні моделі, як правило, утворюються від перетинання двох або кількох бінарних, і в цьому розумінні є внутрішньо суперечливими. Існує питання і до температур плавлення (938,9°C) та кристалізації (947,9°C)  $ScCuAl$  наведених на термограмах.*

**У дискусії взяли участь члени спеціалізованої вченої ради:**

1. **Павлюк В.В.**, професор, доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія; зауваження:

І також мені здається, що було все гарно показано, була комплексна робота, але мені чогось таки не вистарчило сьогодні з ваших відповідей – щоб

ви все таки аргументували, чому у вас ці тверді розчини не зовсім корелюють з тими, які досліджувались раніше. Чи ваші дані точніші чи їхні? Треба дискутувати, або привести, принаймні, дуже переконливі результати.

2. **Миськів М.Г.**, професор, доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія; зауваження:

Що торкається тут, то, власне, у цій роботі більше звертали увагу на кристалохімічну частину. Дуже багато часу, напевно, було витрачено на дослідження тих діаграм стану. Мене дивував той трикутник, правда там на горі не було досліджено сплави. Алюміній плавиться при 650-640 °С, а тут температура була 800°С, але я зрозумів, що, при високому вмісті алюмінію сплави не досліджували, з другого боку підвищення на 200 градусів, від 600 до 800 сприяло тому, що не треба було так довго проводити ті термічні відпали, так я собі подумав. Що торкається тої статистики, власне, та частина сплавів, яка ніби є чиста без алюмінію  $2a$ ,  $2b$  – то є безпараметричне положення. Дивно, чого там трохи  $B$  велике. Можливо, там, все таки, була якась невелика кількість алюмінію.

3. **Котур Б.Я.**, професор, доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія; зауваження:

І мені здається, Насті було б цікаво, маючи дані про ізотермічний перетин при 500, а вона робила при 800, теж якимось чином проаналізувати, дослідити область гомогенності цієї 1:12, тому що вона виявляється при 500 має ширшу область гомогенності ніж при 800. Звичайно це є також цікавий факт, бо як правило, область гомогенності зменшується з підвищенням температури. Ще цікавим є, на мою думку, ця кубічна структура з кількістю атомів понад 100, яку Настя розшифрувала зі співробітниками. Яку сьогодні захищає і по якій було також ряд питань. На мою думку, Насті варто було провести більш детальний кристалохімічний аналіз. Тому що подібні кубічні структури, наприклад,  $Sc_3Zn_{17}$ , який кристалізується у структурному типі  $Ru_3Be_{17}$  теж має кубічну структуру з періодом 13 Å. На мою думку, Настя ще має над чим працювати після сьогоднішнього захисту. Тому що ще й не всі кристалічні

структури до кінця досліджені, зокрема, і ті що були оприлюднені як такі, що існують і при 500°.

4. **Завалій І.Ю.**, професор, доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія; зауваження:

Тим не менше дисертант в своїй роботі знайшла багато нових моментів. Зокрема, вона показала, що наприклад, дослідження системи Sc-Cu-Al при іншій температурі дає на 50% іншу картину по сполуках, фазових рівновагах. І це є цікавим само по собі. Ми стикаємося з тим, що попередні дослідники можливо, різні причини такої різниці, можливо там були нечисті елементи, що деколи викликає появу нових сполук. Можливо, дійсно, якісь сполуки утворюються при низьких температурах, а інші при високих. Хоча існує питання, чому саме при низьких температурах більше сполук ніж при високих. Тому я схильюсь до думки, що при низьких температурах, а попередні дослідники, можливо, використовували менш чисті метали. І деякі сполуки були стабілізовані там домішками кисню чи азоту, що також зустрічається дуже часто. Тим не менше, дисертант знайшла нові сполуки, ці сполуки характеризуються новими цікавими типами, параметрами, зокрема, сполука, яку ми вже тут обговорювали. Є знову ж таки різні дані про направленості твердих розчинів. Це також є дискусійне питання, яке варто було пояснити або як мінімум проаналізувати. В чому була причина, що такі дані повністю суперечать даним отриманим в цій роботі. І я, до речі, більше довіряю даним, отриманим в цій роботі. Логічніше з точки зору радіусів і так далше.

5. **Каличак Я.М.**, професор, доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія; зауваження:

Я хотів би ще раз з акцентувати Вашу увагу на цю сполуку, яка має близько 170 атомів в елементарній комірці. Вона точно є спорідненою до типу  $Ru_3Be_{17}$ . Але ще важливо, що ці сполуки, їх називають – апроксимантами до квазікристалів, а це означає що у вашій системі, зокрема, Sc-Al-Cu, можуть бути також квазікристали. Це вже є об'єкти, які мають надзвичайно цікаві властивості. Ці склади, квазікристалів, вони, як правило, є трохи зміщені по відношенню до тих сполук, до тих апроксимантів. Але вони там можуть бути. На

перспективу, якби Ви мали намір продовжувати, то можна було б відкрити своєрідне полювання за квазікристалами і досліджувати їхні властивості. Так само є і теоретичні цікаві аспекти. Коли ми маємо тверді розчини, то наприклад, у випадку скандію і титану, то вони дозволяють міді і алюмінію утворювати тверді розчини, заміщуватися. А ванадій не допускає такої можливості, він сам вступає у таку взаємодію. Це такі теоретичні аспекти цієї роботи, вони є достатньо цікавими.

При проведенні таємного голосування виявилось, що із 12 членів спеціалізованої вченої ради, які взяли участь у голосуванні (з них 6 докторів наук за профілем дисертації), проголосували:

“За” – 12 членів ради.

“Проти” – немає.

Недійсних бюлетенів – немає.

### ВИСНОВОК

спеціалізованої вченої ради Д 35.051.10 Львівського національного університету імені Івана Франка про дисертаційну роботу Климентій Настасії Олегівни на тему “Системи {Sc,Ti,V}-Cu-Al: фазові рівноваги, кристалічні структури, механічні та електричні властивості”, подану на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія.

Дисертаційна робота Климентій Настасії Олегівни присвячена встановленню фазових рівноваг у системах {Sc,Ti,V}-Cu-Al, визначенню кристалічної структури та вимірюванню деяких властивостей сполук для виявлення особливостей утворення та кристалохімічних закономірностей фаз. Зазначені дослідження дають змогу розширити обсяг відомостей про закономірності взаємодії компонентів, утворення та кристалічної структури тернарних сполук у системах {Sc,Ti,V}-Cu-Al.

Дисертаційна робота виконана на кафедрі неорганічної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка відповідно до напрямів досліджень кафедри, науково-тематичних планів та держбюджетних тем:

“Синтез і кристалохімія нових інтерметалічних сполук з функціональними властивостями” (2015-2017 рр., номер державної реєстрації 0115U003257), “Нові інтерметаліди як основа енергоефективних матеріалів” (2017-2020 рр., номер державної реєстрації 0117U007192), “Синтез і кристалохімія нових інтерметалідів подвійного призначення” (2018-2020 рр., номер державної реєстрації 0118U003609).

### **Основні наукові результати особисто отримані здобувачем:**

У системі Sc-Cu-Al при 800 °C підтверджено існування п'яти тернарних сполук –  $\text{ScCu}_{4,88}\text{Al}_{7,12}$ - $\text{ScCu}_{5,97}\text{Al}_{6,03}$  (структурний тип  $\text{CeMn}_4\text{Al}_8$ ),  $\text{Sc}_2\text{Cu}_{6,25}\text{Al}_{4,75}$  ( $\text{Sc}_2\text{Cu}_{6,25}\text{Al}_{4,75}$ ),  $\text{ScCu}_2\text{Al}$  ( $\text{MnCu}_2\text{Al}$ ),  $\text{ScCu}_{0,6}\text{Al}_{1,4}$  ( $\text{MgNi}_2$ ) та  $\text{ScCuAl}$  ( $\text{MgZn}_2$ ), вперше встановлено існування двох тернарних алюмінідів –  $\text{Sc}_6\text{Cu}_{24,1}\text{Al}_{11,9}$  ( $\text{Sc}_6\text{Cu}_{24,1}\text{Al}_{11,9}$ ) та  $\text{Sc}_3\text{Cu}_{7,49}\text{Al}_{7,51}$  ( $\text{Sc}_3\text{Ni}_{11}\text{Ge}_4$ ), а також утворення неперервного ряду твердих розчинів ScCu-ScAl (CsCl). Розшифровано новий структурний тип  $\text{Sc}_6\text{Cu}_{24,1}\text{Al}_{11,9}$  (символ Пірсона *cI176*, просторова група *Im-3*). Встановлено, що у структурах тернарних сполук системи Sc-Cu-Al утворюються статистичні суміші атомів Al та Cu. Здійснено вимірювання питомого електроопору для семи тернарних алюмінідів.

У системі Ti-Cu-Al при 800°C встановлено існування чотирьох тернарних сполук –  $\text{TiCu}_{0,30}\text{Al}_{2,70}$ - $\text{TiCu}_{0,60}\text{Al}_{2,40}$  ( $\text{Cu}_3\text{Au}$ ),  $\text{Ti}_{1,15}\text{Cu}_{0,09}\text{Al}_{2,76}$  ( $\text{ZrAl}_3$ ),  $\text{TiCu}_2\text{Al}$ - $\text{TiCu}_{2,52}\text{Al}_{0,48}$  ( $\text{MnCu}_2\text{Al}$ ) та  $\text{TiCu}_{0,54}\text{Al}_{1,46}$ - $\text{TiCu}_{1,14}\text{Al}_{0,86}$  ( $\text{MgZn}_2$ ). Для всіх тернарних сполук здійснено вимірювання мікротвердостей.

У системі V-Cu-Al при 800°C встановлено існування твердих розчинів заміщення на основі чотирьох бінарних сполук –  $\text{V}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Al}_3$  ( $x = 0-0,4$ ) ( $\text{TiAl}_3$ ),  $\text{V}_{5-x}\text{Cu}_x\text{Al}_8$  ( $x = 0-0,85$ ) ( $\text{Cu}_5\text{Zn}_8$ ),  $\text{V}_x\text{Cu}_{1,7-x}\text{Al}$  ( $x = 0-0,24$ ) ( $\text{Co}_{1,75}\text{Ge}$ ) та  $\text{V}_x\text{Cu}_{9-x}\text{Al}_4$  ( $x = 0-0,94$ ) ( $\text{Cu}_9\text{Al}_4$ ), визначено їхні межі існування.

На основі експериментальних даних побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану систем {Sc,Ti,V}-Cu-Al при 800°C в повному концентраційному інтервалі, встановлено особливості взаємодії компонентів у цих системах, визначено параметри структури усіх тернарних фаз, зроблено висновки про особливості утворення тернарних сполук, закономірності їхньої кристалічної

будови при переході від Sc, до Ti та V, здійснено аналіз результатів вимірювання механічних і електричних властивостей сполук.

### **Оцінка достовірності і новизни результатів дисертаційної роботи:**

Достовірність результатів експериментальних досліджень базується на кваліфікованому використанні сучасного обладнання з наступним опрацюванням даних за допомогою сучасного комп'ютерного забезпечення, що гарантує їхню достовірність і надійність. Сформульовані у дисертації висновки, зроблені на основі цих результатів, є логічними та науково обґрунтованими. Отримані результати не викликають сумнівів. Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у 5 статтях у фахових наукових виданнях, з них 3 – у виданнях, що входять до наукометричної бази даних Scopus, та тезах 6 доповідей на українських та міжнародних наукових конференціях.

### **Теоретичне та практичне значення роботи та рекомендації щодо використання отриманих результатів:**

Кристалохімічні закономірності, встановлені для інтерметалідів систем {Sc,Ti,V}-Cu-Al, дають змогу прогнозувати утворення сполук у системах, які містять інші *d*-елементи, Cu та Al. Результати дослідження механічних та електричних властивостей сплавів систем {Sc,Ti}-Cu-Al є передумовою подальшого вивчення властивостей різноманітних металічних матеріалів, зокрема, сплавів на основі Sc та Ti. Результати роботи будуть використані для ідентифікації фаз при розробці матеріалів на основі *d*-металів або рідкісноземельних металів, купруму та алюмінію. Кристалографічні та дифракційні характеристики сполук  $Sc_6Cu_{24,1}Al_{11,9}$  (структурний тип  $Sc_6Cu_{24,1}Al_{11,9}$ ) та  $Sc_3Cu_{7,49}Al_{7,51}$  ( $Sc_3Ni_{11}Ge_4$ ) внесені в базу Міжнародного центру дифракційних даних (ICDD, США), а сполук  $ScCu_{0,6}Al_{1,4}$  ( $MgNi_2$ ) та  $Sc_3Cu_{7,49}Al_{7,51}$  ( $Sc_3Ni_{11}Ge_4$ ) – в базу Pearson's Crystal Data (США, Швейцарія, Японія).

За актуальністю, новизною, науковим рівнем, обсягом, сукупністю одержаних результатів та глибиною їхнього аналізу дисертаційна робота **Климентій Настасії Олегівни “Системи {Sc,Ti,V}-Cu-Al: фазові рівноваги, кристалічні структури, механічні та електричні властивості”**, є завершеним

у межах поставлених завдань науковим дослідженням, містить особисто отримані здобувачем науково обгрунтовані результати, які розв'язують завдання синтезу, вивчення взаємодії компонентів, встановлення фазових рівноваг та кристалічної структури сполук, а також механічних та електричних властивостей окремих сполук, що має важливе значення в галузі неорганічної хімії та кристалохімії.

Дисертаційна робота відповідає паспорту спеціальності 02.00.01 – неорганічна хімія та вимогам п. 9, 11, 12 “Порядку присудження наукових ступенів”, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року № 567 із змінами № 656 від 19.08.2015, № 1159 від 30.12.2015, № 567 від 27.07.2016, а також вимогам Міністерства освіти і науки України до кандидатських дисертацій, а її автор, Климентій Настасія Олегівна, заслуговує присудження наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.01 – неорганічна хімія.

Головуючий на засіданні

голова спеціалізованої вченої ради Д 35.051.10,

д.х.н., професор

Каличак Я.М.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 35.051.10

д.х.н., професор

Яремко З.М.

М.П. «\_\_\_»\_\_\_\_\_ 2020 р.

Підписи проф. Каличака Я. М. та Яремка З. М. засвідчую

Вчений секретар ЛНУ ім. Івана Франка, доцент

Грабовецька О.С.

Атестаційна справа зареєстрована у МОН України під № \_\_\_\_\_

Затверджено рішення спеціалізованої вченої ради про присудження наукового ступеня кандидата хімічних наук рішенням атестаційної колегії МОН України від «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ року.

Видано диплом \_\_\_\_\_

(серія, номер)

Начальник відділу \_\_\_\_\_

(прізвище, ініціали)