



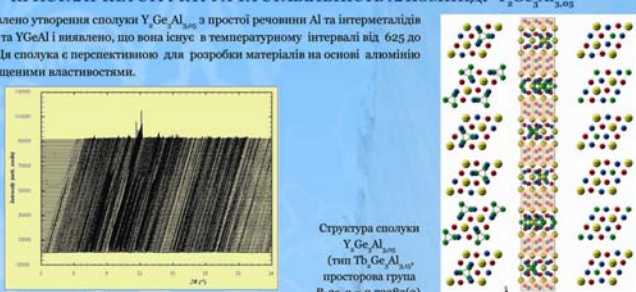
Науково-навчальний центр «Фрактал»

Львівський національний університет імені Івана Франка

Лабораторія синтезу і структури наномодульованих і нанокомпозитних матеріалів на основі інтерметалідів

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТА СТАБІЛЬНІСТЬ АЛЮМІНІДУ $Y_3Ge_3Al_{23,05}$

Встановлено утворення сполуку $Y_3Ge_3Al_{23,05}$ з простої речовини Al та інтерметалідів $YGeAl_3$ та $YGeAl_2$ і виявлено, що вона існує в температурному інтервалі від 625 до 745°C. Ця сполука є перспективною для розробки матеріалів на основі алюмінію з покращеними властивостями.



Синхротронні дифрактограми сплавів $Y_3Ge_3Al_{23,05}$, отримані in-situ при нагріванні

Структура сполуку $Y_3Ge_3Al_{23,05}$ (тип $Tb_3Ge_3Al_{23,05}$), просторова група $R\bar{3}c$, $a = 0,72383(2)$, $c = 8,7979(3)$ (нм)

НОВИ БАГАТОКОМПОНЕНТНІ ІНТЕРМЕТАЛІДИ: СТРУКТУРА ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ

$Er_2NiAl_3Ge_8$

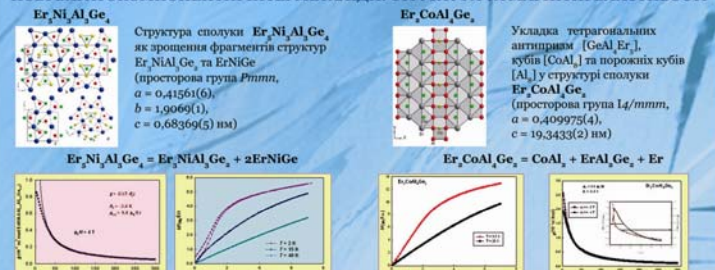
Структура сполуку $Er_2NiAl_3Ge_8$, як зрощення фрагментів структури $ErNiAl_3Ge_8$ та $ErNiGe$ (просторова група $P4mm$, $a = 0,41561(6)$, $b = 1,90669(1)$, $c = 0,68369(5)$ (нм))

$Er_2NiAl_3Ge_8 = Er_2NiAl_3Ge_6 + 2ErNiGe$

$Er_3CoAl_3Ge_8$

Укладка тетрагональних антиправ [GeAl₂Er]₄ субів [CoAl₂] та порожніх кубів [Al₃] у структурі сполуку $Er_3CoAl_3Ge_8$ (просторова група $I4/mmm$, $a = 0,409975(4)$, $c = 19,3433(2)$ (нм))

$Er_3CoAl_3Ge_8 = CoAl_3 + ErAl_3Ge_8 + Er$



$Er_2NiAl_3Ge_8$ є парамагнетиком ($\mu_p = 9,8$ $\mu B/Er$; $\theta_p = -3,6$ К). При $T = 4,3$ К відбувається антиферомагнітне впорядкування.

$Er_3CoAl_3Ge_8$ є парамагнетиком ($\mu_p = 9,9$ $\mu B/Er$; $\theta_p = -3,8$ К). Крива намагнічування при $T = 3,5$ К вказує на метамігнітний перехід в області $\mu H = 1,5$ Т. Разом із негативним значенням θ_p це вказує на можливе антиферомагнітне впорядкування при нижчих температурах.

МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕРХНІ НУЛЬОВОГО ПОТЕНЦІАЛУ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР

$$P(r) = \frac{1}{\pi^2} \sum_{\mathbf{h}} \frac{|F_{\mathbf{h}}|^2}{|\mathbf{h}|^2} \exp(-Zn\mathbf{h}r) - \frac{q}{\pi} \int \frac{d\mathbf{h}}{|\mathbf{h}|} \exp(-Zn\mathbf{h}r)$$

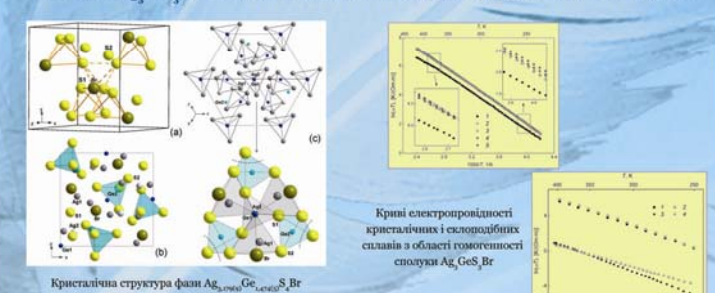
Поверхній нульового потенціалу є важливим для аналізу хімічного зв'язку та фазових переходів в неорганічних сполуках. Проаналізовано структуру та фазові перетворення в системі $NaNH_3-NaBH_4$, у системі утворення сполука Na_4BNH_8 , яка має дві (α та β) модифікації. Експериментально визначено структуру α -модифікації (просторова група $Rm\bar{3}m$, $a = 0,46950(1)$ нм).



"Periodic Nodal Surface" – поверхня нульового потенціалу для структури α -модифікації сполуку Na_4BNH_8

Кристалічна структура α - та β -модифікацій сполуку Na_4BNH_8

СПОЛУКА Ag_6GeS_8Br – ПЕРСПЕКТИВНА ОСНОВА ДЛЯ СУПЕРІОНИХ МАТЕРІАЛІВ



Криві електропровідності кристалічних і склоподібних сплавів в області гомогенності сполуку Ag_6GeS_8Br

Кристалічна структура фази Ag_6GeS_8Br (просторова група $P2_13$, $a = 1,016572(3)$ нм)

ПОТРІБНА СИСТЕМА $Y-Cu-Mg$ ПРИ 400 °C

У системі $Y-Cu-Mg$ встановлено існування 10 тернарних фаз. Для 7 інтерметалідів визначено кристалічну структуру. Спостерігається розчинність третього компонента в бінарних сполуках YCu та YMg , яка не перевищує 10 ат. %.



Изотермічний перехідні діаграми сплаву системи $Y-Cu-Mg$ при 400 °C

Сполука	Структурний тип	Параметри комірки, нм		
		a	b	c
$r_1-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP24-Mg_3Cu_3Sn$	0,7231(2)	-	-
$r_2-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP24-Mg_3Cu_3Sn$	0,7260(1)	-	-
$r_3-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP19-Sb_3Fe_2$	0,7617(3)	-	0,3726(3)
$r_4-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP19-Sb_3Fe_2$	0,7597(4)	-	0,3727(3)
$r_5-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP19-Sb_3Fe_2$	0,7619(3)	-	0,3736(1)
$r_6-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP9-ZnAl_2$	0,7441(5)	-	0,3993(3)
$r_7-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP36-Y_3Cu_3Mg_4$	2,636(9)	0,4008(7)	0,7419(6)
$r_8-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP36-Y_3Cu_3Mg_4$	0,4068(5)	1,9196(3)	2,5741(3)
$r_9-Y_3Cu_3Mg_4$	невідомо	-	-	-
$r_{10}-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP5104-Y_3Cu_3Mg_4$	0,4116(2)	1,9136(4)	2,8983(6)
$r_{11}-Y_3Cu_3Mg_4$	$rP5104-Y_3Cu_3Mg_4$	1,3549(3)	2,0291(4)	0,3892(7)
$r_{12}-Y_3Cu_3Mg_4$	невідомо	-	-	-
$r_{13}-Y_3Cu_3Mg_4$	невідомо	-	-	-
$r_{14}-Y_3Cu_3Mg_4$	невідомо	-	-	-

ЛІТІВІ ХІМІЧНІ ДЖЕРЕЛА СТРУМУ

Основні характеристики літій-іонних ХЛД:
 - значення питомої енергії: до 260 Вт·г/кг
 - максимальна напруга зарядженого акумулятора: 4,2 В
 - ефективність циклювання складу > 90 %
 - відсутність "ефекту пам'яті"
 - значно менше пожежо- та вибухонебезпечність.
 - температурний інтервал роботи електроду від -50 до +50 °C



Дослідний макет

Заряд-розрядні характеристики анода

НОВИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ СПОЛУК ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ $MgAgAs$

Легування напівпровідника $ZnSn$ з кубичною структурою типу $MgAgAs$ (напів-Гейслерова фаза) акцепторною домішкою ербію приводить до зміни знаку основних носіїв струму та переходу провідності ізолятор-метал.

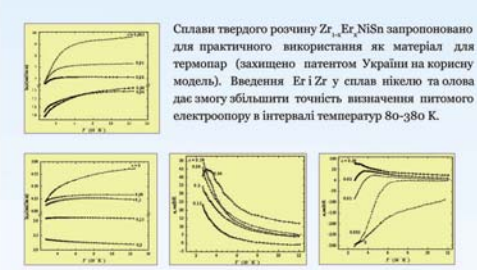


Кристаліграфічні, електрофізичні та енергетичні характеристики сплавів твердого розчину $Zr_{1-x}Er_xNiSn$

Сплав	a , нм	α , мВ/К		ρ , мОм/см		S_F , мВ	S_F^2 , мВ ²
		90 К	300 К	90 К	300 К		
$ZnSn$	0,61094(1)	-98,3	-279,8	126,3	78,6	28,9	1,6
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61189(1)	-1,8	-265,5	14999,4	868,9	152,7	3,9
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61170(3)	5,7	-24,7	1468,9	560,7	98,8	1,6
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61165(3)	13,1	38,7	459,8	364,3	62,6	-
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61238(4)	12,7	44,1	198,0	168,5	16,9	-
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61243(3)	27,1	73,9	204,0	159,6	14,7	-
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61316(2)	5,9	32,9	76,2	70,1	10,7	-
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61347(3)	4,9	37,9	69,9	65,2	7,3	-
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61402(1)	-0,7	14,4	22,2	22,5	2,7	-
$Zr_{0,9}Er_{0,1}NiSn$	0,61515(1)	4,3	25,8	9,1	10,3	-	-

НОВИ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ МАТЕРІАЛИ НА ОСНОВІ СПОЛУК ЗІ СТРУКТУРОЮ ТИПУ $MgAgAs$

Сплави твердого розчину $Zr_{1-x}Er_xNiSn$ запропоновано для практичного використання як матеріал для термопар (захисний патентом України на корисну модель). Введення Er і Zr у сплав нікелю та слога дає змогу збільшити точність визначення питомого електроопору в інтервалі температур 80-380 К.



Температурні залежності електроопору та термо-е.р. сплавів твердого розчину $Zr_{1-x}Er_xNiSn$

