Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Image not found or type unknow

Державний обліковий номер: 0823U100630

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-09-2023

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Ректора Львівського національного університету імені Івана Франка від 25.09.2023 р. № 3628

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Павлюк Назар Володимирович
2. Nazar V. Pavlyuk

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5732-0545

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Хімія

Дата захисту: 07-09-2023

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 35.051.113_ID 1994

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Взаємодія магнію із літієм, d-металами (Mn, Fe, Co, Ni) та p-елементами (Al, Ga, Ge, Sn)

2. Interaction of magnesium with lithium, d-metals (Mn, Fe, Co, Ni) and p-elements (Al, Ga, Ge, Sn)

Реферат/анотація:

1. В роботі приведені експериментальні результати з дослідження взаємодії компонентів у потрійних системах Mg-{ Mn, Fe, Co, Ni }-{Ga, Al, Ge, Sn} та Mg-Li-Cu-Al, кристалічної та електронної структури, електрохімічних, сорбційних, магнітних і електричних властивостей тернарних фаз на основі магнію. Для системи Mg-Ni-Ga вперше побудовано ізотермічний переріз при 200°C та виявлено існування семи потрійних сполук □1– MgNi1+xGa1-x (структурний тип MgCu2), □2– MgNiGa (структурний тип MgZn2), □3– Mg2NiGa3 (структурний тип Mg2MnGa3), □4– Mg9-xNi6Ga14-y (структурний тип власний, Fd-3m, a = 19,8621(6) Å), □5– MgNi2Ga2 (структура невідома), □6– MgNi2Ga5 (структурний тип MgCo2Ga5); □7– MgNi6Ga6 (структурний тип ScFe6Ga6); □8– Mg3Ni2Ga (структурний тип Mn3Ni2Si). Для системи Mg-Co-Ga вперше побудовано ізотермічний переріз діаграми стану при 200 °C. Встановлено існування чотирьох нових інтерметалідів, які є новими структурними типами: □1– MgCo2Ga5 (просторова група Pnnm, a = 6,2486, b = 6,6652, c = 6,0523 Å; □3– MgCoGa2 (P21/c, a = 5,1505(2) Å, b =7,2571(2) Å, c = 8,0264(3) Å, □ = 125,571(3); □4– Mg0,74CoGa0,52 (Cmcm, a =

4,9868(9), b = 25,959(4), c = 8,0508(11) Å); □5– Mg0,49CoGa0,15 (R-3m, a = 4,9296(2), c =12,0744(7) Å). Побудований ізотермічний переріз системи Mg-Mn-Ga при 200 °C та встановлено існування шести потрійних сполук: □1– MgMn4Ga18 (власний структурний тип), □2– MgMn2Ga5 (структурний тип MgCo2Ga5), □3 – Mg2MnGa3 (власний структурний тип), □4– MgMn0,7Ga1,3 (тип MgZn2), □5 – Mg2Mn6Ga5 (структурний тип Cu5Zn8), □6– Mg2Mn2Ga (структурний тип □-Mn). Для цієї системи встановлено структуру нових структурних типів Mg2MnGa3 (Cmcm, a = 5,4324(1), b = 8,6959(3), c = 8,5858(2) Å) та MgMn4Ga18 (P4/mmm, a = 8,3116(9), c = 9,944(2) Å). В досліджених системах Mg-{Mn, Co, Ni}-Ga встановлені області гомогенності тернарних фаз та визначена розчинність третього компонента у бінарних фазах. Найбільш протяжними є тверді розчини на основі фаз Лавеса. Окрім описаних вище фазових рівноваг у системах Mg-{Mn, Co, Ni}-Ga решта систем Mg-{Mn, Fe, Co, Ni}–{Al, Ge, Sn} та Mg-{Fe}–Ga вивчалися на предмет утворення тернарних сполук. В досліджених та споріднених системах методами монокристала та порошку підтверджено існування 14 відомих та знайдено 38 нових інтерметалічних сполук. Для всіх синтезованих нових сполук визначено кристалічні структури, які належать до 29 структурних типів, 8 з яких є новими. Більшість досліджених сполук належить до двох родин інтерметалідів. Перша – похідні від фаз Лавеса, та друга – кластерні інтерметаліди. Для синтезованих фаз проведено дослідження магнітних властивостей. Найбільш цікавими виявилися сполуки Mg2Mn2Al та MgMn4Ga18. Фазу Mg2Mn2Al, яка кристалізуються у структурному типі □-Mn, можна віднести до м'яких феромагнетиків. На основі результатів вивчення залежності магнітної сприйнятливості від температури і кривих намагнічення виявлено, що для сполуки MgMn4Ga18 спостерігається в основному позитивна сприйнятливість, яка не залежить від температури (парамагнетизм Паулі) в інтервалі від 6 К до 300 К. Різке падіння сприйнятливості нижче 6 К із діамагнітною поведінкою вказує на існування надпровідності нижче 6 К. За допомогою електрохімічних досліджень випробувано інтерметаліди із структурою типу фаз Лавеса в якості анодних матеріалів для хімічних джерел струму. Одержані результати показали, що їм характерна висока розрядна ємність (до 80 мА·год/г), електроди легко активуються, що дозволяє використовувати їх в реальних металогідридних джерелах струму. Газове гідрування також підтверджує їх високу сорбційну ємність до 2,5 ваг % H2. Встановлено, що для фаз Лавеса заміщення d-металу p-елементом покращує абсорбційну ємність.

2. The thesis presents experimental results from the study of the interaction of components in the ternary systems Mg-{ Mn, Fe, Co, Ni}-{Ga, Al, Ge, Sn} and Mg-Li-Al, crystal and electronic structures, electrochemical, sorption, magnetic and electrical properties of magnesium-based ternary phases. For the Mg-Ni-Ga system, an isothermal section at 200 °C was constructed for the first time and the existence of seven ternary compounds □1– MgNi1+xGa1-x (structure type MgCu2), □2– MgNiGa (structure type MgZn2), □3– Mg2NiGa3 (structure type Mg2MnGa3), □4– Mg9-xNi6Ga14-y (new structure type, Fd-3m, a = 19.8621(6) Å), □5– MgNi2Ga2 (structure unknown), □6– MgNi2Ga5 (structure type MgCo2Ga5); □7– MgNi6Ga6 (structure type ScFe6Ga6); □8– Mg3Ni2Ga (structure type Mn3Ni2Si). For the Mg-Co-Ga system, for the first time, an isothermal section of diagrams at 200 °C was constructed. The existence of four new intermetallics, which are new structure types, was established: □1– MgCo2Ga5 (space group Pnnm, a=6.2486, b=6.6652, c=6.0523 Å; □3– MgCoGa2 (P21/c, a=5.1505(2) Å, b=7.2571(2) Å, c=8.0264(3) Å, □=125.571(3); □4– Mg0,74CoGa0,52 (Cmcm, a=4.9868(9), b=25.959(4), c=8.0508(11) Å); □5– Mg0,49CoGa0,15 (R-3m, a=4.9296(2), c=12.0744(7) Å). An isothermal section of the Mg-Mn-Ga system at 200 °C was constructed and the existence of six ternary compounds was established: □1– MgMn4Ga18 (new structure type), □2– MgMn2Ga5 (structure type MgCo2Ga5), □3– Mg2MnGa3 (new structure type), □4– MgMn0, 7Ga1,3 (MgZn2 type), □5– Mg2Mn6Ga5 (Cu5Zn8 structure type), □6– Mg2Mn2Ga (□-Mn structure type). The phases Mg2MnGa3 (Cmcm, a=5.4324(1), b=8.6959(3), c=8.5858(2) Å) and MgMn4Ga18 (P4/mmm, a = 8.3116(9), c = 9.944(2) Å) are new structure types. In the studied phase diagrams of Mg-{Mn, Co, Ni}-Ga systems, regions of homogeneity of ternary phases were established and the solubility of the third component in binary phases was determined. The most extensive are solid solutions based on Laves phases. In addition to the above-described phase equilibria in the Mg-{Mn, Co, Ni}-Ga systems, the rest of the Mg-{Mn, Fe, Co, Ni}–{Al, Ge, Sn} and Mg-{Fe}–Ga systems were studied for formation of ternary compounds. In the studied and related systems, the existence of 14 known and 38 new intermetallic compounds was confirmed by single crystal and powder methods. Crystal structures belonging to 29 structural types, 8 of

which are new, have been determined for all synthesized new compounds. Most of the studied compounds belong to two families of intermetallics. The first – derivatives of Laves phases, and the second – cluster intermetallics. Magnetic properties were studied for the synthesized phases. The most interesting compounds were Mg2Mn2Al and MgMn4Ga18. The Mg2Mn2Al phase, which crystallizes in the □-Mn structure type, can be classified as soft ferromagnets. Based on the results of studying the dependence of magnetic susceptibility on temperature and magnetization curves, it was found that for the compound MgMn4Ga18 there is mainly a positive susceptibility that does not depend on temperature (Pauli paramagnetism) in the range from 6 K to 300 K. A sharp drop in susceptibility below 6 K with diamagnetic behavior indicates the existence of superconductivity below 6 K. With the help of electrochemical studies, intermetallics with a Laves phase type of structure were tested as anode materials for batteries. The observed results showed that they are characterized by a high discharge capacity (up to 80 mAh/g), the electrodes are easily activated, which allows them to be used in real metal hydride batteries. Gas hydrogenation also confirms their high sorption capacity up to 2.5 wt % H2. It was established that for Laves phases, the replacement of d-metal by p-element improves the absorption capacity.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., & Ehrenberg, H. (2019). Li20Mg6Cu13Al42: a new ordered quaternary superstructure to the icosahedral T-Mg32(Zn,Al)49 phase with fullerene-like Al60 cluster. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 75(2), 168-174. (Scopus, Q1).
- 2. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Rozdzynska-Kielbik, B., Nitek, W., Lasocha, W., Chumak, I., Ehrenberg, H. (2020). A new monoclinic structure type for ternary gallide MgCoGa2. Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry, 76(6), 541-546. (Scopus, Q4).
- 3. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Rozdzynska-Kielbik, B., Cichowicz, G., Cyranski, M. K., Chumak, I., Ehrenberg, H. (2020). New cubic cluster phases in the Mg–Ni–Ga system. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 76(4), 534-542. (Scopus, Q1).
- 4. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Rożdżyńska-Kiełbik, B., Gil, A., Chumak, I., & Ehrenberg, H. (2020). New ternary MgCo2Ga5 and MgNi2Ga5 gallides. Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials, 235(11), 513-521. (Scopus, Q3).
- 5. Pavlyuk, N., Chumak, I., Pavlyuk, V., Ehrenberg, H., Indris, S., Hlukhyy, V., & Pöttgen, R. (2022). Mg2MnGa3 – An orthorhombically distorted superstructure variant of the hexagonal Laves phase MgZn2. Zeitschrift für Naturforschung B, 77(10), 727-733. (Scopus, Q3).
- 6. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Chumak, I., Indris, S., & Ehrenberg, H. (2022). Mg-Ni-Ga System: Phase Diagram, Structural and Hydrogenation Properties of MgNi1.25Ga0.75, MgNiGa, and Mg2NiGa3. Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 43(4), 458-470. (Scopus, Q2).
- 7. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Chumak, I., Indris, S., Schwarz, B., & Ehrenberg, H. (2022). MgMn4Ga18: a novel three-shell gallium cluster structure. Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry, 78(8), 455-461. (Scopus, Q4).
- 8. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Ciesielski, W., Rozdzynska-Kielbik, B., Indris, S., & Ehrenberg, H. (2023). A new ternary derivative of the Laves phases in the Mg–Co–Ga system. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials, 79(4). (Scopus, Q2).

- 9. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Ehrenberg, H. (2019). New cubic Li20Mg6Cu13Al24Si18 ordered high entropy phase. Тези XVII наукової конференції «Львівські хімічні читання – 2019». Львів, 2-5 червня 2019, H-1.
- 10. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Cichowicz, G., Cyrański, M.K., Ehrenberg, H. (2019). New cubic phases in the Mg–Ni–Ga system. Coll. abs. XIV International Conference of Crystal Chemistry of Intermetallic Compounds., Lviv, Ukraine, September 22–26, 2019, 111.
- 11. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Ciesielski, W., Pavlyuk, V., Ehrenberg, H. (2020). Crystal structure of Mg0.23NiSn1.77. Abstracts of the XXII International Seminar of Physics and Chemistry of Solids and advanced Materials, Lviv, 17-19 June 2020, 21.
- 12. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Ciesielski, W., Pavlyuk, V. (2021) Crystal structure of the novel MgT6Ga6 (T=Ni, Pd) ternary compounds. International Conference on Solid Compounds of Transition Elements SCTE 2021, Wrocław, Poland, 12-15 April 2021, 202.
- 13. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Ciesielski, W., Pavlyuk, V. (2021). New cubic disordered phase of Mg6Ni16+xGe7+y (x=0.05, y=0.36). XVIII наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2021», 31 травня – 2 червня 2021 р., H17.
- 14. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Indris, S., Schwarz, B. (2022). MgMn4Ga18: new structural type with three core-shell cluster packing. 33rd European Crystallographic Meeting: Book of abstracts, Versailles, France, August 23-27, 2022, 498-499.
- 15. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V., Ehrenberg, H. (2022). Crystal structures of intermetallic compounds with core-shell clusters. New point of view. Current problems of chemistry, materials science and ecology: Proceedings, Lutsk, Ukraine, 1-3 June 2022, 12.
- 16. Pavlyuk, N., Dmytriv, G., Pavlyuk, V. (2023) A new ternary derivative of the Laves phases in the Mg-Co-Ga system. XIX Наукова конференція "Львівські хімічні читання - 2023". 29–31 травня 2023.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: № 0115U003257, 0121U109766, 0121U107937, 0123U100599.

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дмитрів Григорій Степанович

2. Grygoriy S. Dmytriv

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3138-656X

Додаткова інформація: Scopus Author ID 6603159097; Web of Science Researcher ID: J-9275-2016; https://scholar.google.com/citations?user=Lp53G6cAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пірський Юрій Кузьмич

2. Yurii K. Pirskyy

Кваліфікація: д.х.н., с.н.с., 02.00.05

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9431-4136

Додаткова інформація: Scopus Author ID 15841863400; Web of Science Researcher ID: GBF-1826-2022

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гумінілович Руслана Ростиславівна

2. Ruslana R. Guminilovych

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6770-7260

Додаткова інформація: Scopus Author ID 55783013400; https://scholar.google.com/citations?user=r7kk0k8AAAAJ; Web of Science Researcher ID: CSO-4571-2022, EWT-7103-2022

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Міліянчук Христина Юріївна

2. Khrystyna Y. Miliyanchuk

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0601-6460

Додаткова інформація: Scopus Author ID 9533589300; Web of Science Researcher ID: L-2186-2017; https://scholar.google.com.ua/citations?user=5XC6kSkAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токайчук Ярослав Олексійович

2. Yaroslav O. Tokaychuk

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5711-6085

Додаткова інформація: Scopus Author ID 6506218972; Web of Science Researcher ID: GXV-2848-2022; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=qIP-y4gAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Бабіжецький Володимир Станіславович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Бабіжецький Володимир Станіславович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Жак Ольга Володимирівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна