

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0419U004855

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 13-11-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Качмар Андрій Ігорович
2. Kachmar Andrii Ihorovych

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.18

**Назва наукової спеціальності:** Фізика і хімія поверхні

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 19-10-2019

**Спеціальність за освітою:** Фізика

**Місце роботи здобувача:** ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

**Код за ЄДРПОУ:** 02125266

**Місцезнаходження:** вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Івано-Франківська обл., 76018, Україна

**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 20.051.06

**Повне найменування юридичної особи:** Коломийський інститут ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

**Код за ЄДРПОУ:** 25735101

**Місцезнаходження:** вул. Лисенка, 8, м. Коломия, Коломийський р-н., Івано-Франківська обл., 78200, 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:** ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

**Код за ЄДРПОУ:** 02125266

**Місцезнаходження:** вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Івано-Франківська обл., 76018, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.33, 59.29.29

**Тема дисертації:**

1. Механізми накопичення заряду електрохімічними системами на основі нанокомпозитів вуглець/оксиди і сульфід металів.
2. Charge storage mechanisms of electrochemical systems based on metal oxides or sulfides and carbonnanocomposite materials.

**Реферат:**

1. На основі проведених комплексних експериментальних досліджень і теоретичних розрахунків встановлено оптимальні умови отримання та модифікації активованого вуглецевого матеріалу легованого азотовмісними групами, за яких даний матеріал забезпечує хороші показники питомої ємності, питомої площі поверхні та провідності при його використанні в якості вихідного матеріалу при створенні електрохімічних систем накопичення енергії. В роботі описано кристалічну структуру, морфологію та електричні властивості оксиду та сульфиду молібдену та комплексів на основі оксид/сульфід молібдену та вуглець/оксид графену, які отримувались використовуючи низькотемпературний гідротермальний синтез

при різному масовому співвідношенні вихідних матеріалів. Показано, що підвищена електропровідність композиційних матеріалів дозволяє ефективно використовувати окисно-відновну складову питомої ємності  $\text{MoO}_2$ . Значення питомої ємності композиту  $\text{MoO}_2/\text{rGO}$  (1:2), розрахована з даних гальваностатичного циклу при густині струму 1 А/г, досягає 395 Ф/г. Питома ємність цього матеріалу з даних циклічної вольтамперограми становить 232 Ф/г при швидкості сканування 0,5 мВ/с. Аналогічні дані спостерігаються для матеріалу  $\text{MoO}_2/\text{Carbon}$  з масовим співвідношенням компонентів 1:1. Після ретельного дослідження даних, отриманих для електрохімічних систем на основі одержаних композитів в електролітичному середовищі, запропоновано схему можливих механізмів окисно-відновних реакцій на матеріалах електродів  $\text{MoO}_2/\text{rGO}$  та  $\text{MoO}_2/\text{Carbon}$ . Для матеріалів систем  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoS}_2/\text{rGO}$  та  $\text{MoS}_2/\text{Carbon}$  при аналізі даних гальваностатичного циклювання та результатів ЦВА-циклювання спостерігається максимальна розрядна ємність для випадку композиту  $\text{MoS}_2/\text{Carbon}$  (близько 190 Ф/г при розрахунку з гальваностатичного циклювання та близько 200 Ф/г для ЦВА-циклювання). Окрім того, саме цей матеріал характеризується порівняно найменшою швидкістю спаду ємності з ростом струму розряду чи ростом швидкості сканування потенціалу.

2. The conducted experimental investigations and theoretical calculations made it possible to establish the nature and general patterns of charge accumulation in electrochemical systems that are formed on the basis of  $\text{Mo}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MoS}_2$  and  $\text{MoO}_2/\text{rGO}$ ,  $\text{MoO}_2/\text{Carbon}$ ,  $\text{MoS}_2/\text{rGO}$ ,  $\text{MoS}_2/\text{Carbon}$  nanocomposite materials. Functioning of these electrochemical systems is associated with the presence of electric double layer and reversible faradaic processes. Transport processes in these structures have been investigated. Optimal conditions for obtaining and modifying activated carbon material doped with nitrogen-containing groups have been established. Under these conditions the material was characterized by high values of specific capacitance, specific surface area and electrical conductivity when used as a material for the creation of electrochemical energy storage systems. It has been found that the only mechanism of charge accumulation for capacitors based on alkaline-activated materials is the recharge processes of the electric double layer without the participation of redox reactions. It has been investigated that pore volume increases and the formation of  $\text{NO}_2$  nitrogen groups on the surface of carbon particles is observed due to the double thermochemical activation of the porous carbon material with the participation of the  $\text{NaOH}$  activating agent and  $\text{HNO}_3$  doping of the carbon matrix. The crystalline structure, morphology and electrical properties of molybdenum oxide and sulfide and complexes on the basis of molybdenum oxide/sulfide and carbon/graphene oxide have been described. The materials were synthesized by low-temperature hydrothermal method at different mass ratio of precursors. It has been found that the specific electrical conductivity values of composite materials are an order of magnitude higher than that of pure  $\text{MoO}_2$ . This allows the efficient use of the redox component of  $\text{MoO}_2$  specific capacitance in the creation of hybrid electrochemical systems. The specific capacitance value of  $\text{MoO}_2/\text{rGO}$  (1:2) composite materials was calculated according to the data of the galvanostatic cycle at a current density value of 1 A/g and reached 395 F/g. The specific capacitance value for this material from cyclic voltammogram data is 232 F/g at a scan rate value of 0.5 mV/s. Similar data were observed for  $\text{MoO}_2/\text{Carbon}$  composite material with components' mass ratio of 1:1. After careful study of the data obtained for electrochemical systems on the basis of the obtained composite materials in the electrolytic medium the scheme of possible mechanisms of redox reactions on the materials of  $\text{MoO}_2/\text{rGO}$  and  $\text{MoO}_2/\text{Carbon}$  electrodes was proposed. Diffusion coefficient values of  $1.3 \cdot 10^{-12}$  and  $4.1 \cdot 10^{-12}$   $\text{cm}^2/\text{s}$  were calculated for  $\text{MoO}_2/\text{rGO}$  materials with 1:1 and 1:2 ratios, respectively. When analyzing the galvanostatic and potentiodynamic cycling data for the materials of the  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoS}_2/\text{rGO}$  and  $\text{MoS}_2/\text{Carbon}$  systems, the maximum discharge capacitance is observed for the case of  $\text{MoS}_2/\text{Carbon}$  composite material (about 190 F/g for galvanostatic data and about 200 F/g for potentiodynamic cycling). Moreover, this material was characterized by the relatively slowest rate of the capacitance decrease with discharge current increasing or scan rate increasing.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Будзуляк Іван Михайлович

2. Budzulyak Ivan Mykhailovych

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.18

**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. Мудрий Степан Іванович

2. Mudry Stepan Ivanovych

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.13

**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. Лукіянець Богдан Антонович

2. Lukiiianets Bohdan Antonovych

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.02

**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**

Остафійчук Богдан Костянтинович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Остафійчук Богдан Костянтинович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.