Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0517U000414

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-06-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ільницький Роман Васильович
2. Ilnytskyi Roman Vasylevych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 08-06-2017

Спеціальність за освітою: 7.070101

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

Код за ЄДРПОУ: 02125266

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

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: 76018, Україна, м.Івано-Франківськ, вул.Шевченка, 57

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.19

Тема дисертації:

1. Інтеркаляційне струмоутворення у модифікованих нанодисперсних системах TiO2, TiO2/C

2. Intercalated Current-Formation in the TiO2, TiO2/C Modified Nanodispersed Systems

Реферат/анотація:

1. У дисертаційній роботі представлені дослідження сумісного впливу термічного відпалу, лазерного опромінення та допування на фізико-хімічні властивості нанокомпозитів, сформованих на основі нанодисперсного TiO2, допованого Zr, Nb, Fe та C. Встановлено взаємозв'язки між умовами та режимами отримання і моди-фікації складових композиту та закономірностями перебігу електрохімічних процесів у пристроях накопичення і генерування електричної енергії. Знайдені оптимальні умови лазерної модифікації, за яких даний матеріал забезпечує високі питомі ємнісні характеристики літієвих джерел струму. Показано, що питома ємність електрохімічної системи, сформованої на основі модифікованого композиту TiO2/C, при струмах 1-5 мА в 15-50 разів більша за аналогічну ємність для вихідного композиту, що свідчить про формування матриці зі значною кількістю гостьових позицій, здатних істотно інтенсифікувати

заряд/розрядні процеси. На основі комплексних досліджень показано вплив впроваджених елементів Zr і Nb та термічного відпалу на кристалічну структуру, морфологію поверхні TiO2. Виявлено, що легування TiO2 ніобієм забезпечує термічну стабільність фази анатазу до температур 1123 К. Згідно з результатами Х-променевого аналізу TiO2, легованого цирконієм, вміст рутилу після відпалу становив ~ 30 %. Даний матеріал характеризується пористою структурою зі значенням питомої площі 260 м2/г, що є на 40 % більшою у порівнянні із отриманими даними для нелегованого та легованого ніобієм TiO2. Методом термогравіметрії виявлено, що вміст води в ньому становить до 20 % від початкової маси. Ширина забороненої зони діоксиду титану, згідно з даними УФ-спектроскопії, зменшується від 3,5 еВ до 2,5 еВ при легуванні TiO2 цирконієм та відпалом при температурі до 1123 К відповідно, причиною чого є поява енергетичних рівнів у забороненій зоні TiO2 внаслідок утворення вакансій оксигену після відпалу, що підтверджено рентгенівською фотоелектронною спектроскопією. Вперше застосовано легований TiO2 цирконієм та ніобієм і відпалений при 673 К і 1123 К у якості катодних матеріалів літієвих джерел струму (ЛДС). Показано ефективність поєднання даних методів модифікації щодо покращення інтеркаляції йонів літію у структуру діоксиду титану. Значення питомих енергетичних характеристик ЛДС збільшилося на 50 % і 20% при легуванні TiO2 цирконієм і ніобієм відповідно із наступним їх відпалом при 1123 К. Експериментально доведено, що електрохімічна інтеркаляція йонів літію у рутильну структуру фториду магнію є двостадійним процесом, що полягає у первинному заповненні порожнин структурних каналів поверхневих шарів, накопиченні на поверхні металічного літію та подальшому заповненні вільних "гостьових" позицій в об'ємі структури катодної матриці за рахунок дифузії літію. Досліджено кінетику дифузії літію у структуру MgF2 та MgF2/C. Встановлено, що в процесі накопичення інтеркальованого літію матрицею селеїту рутильної структури коефіцієнт дифузії змінюється немонотонно залежно від встановленої катод-анодної різниці потенціалів, при цьому спостерігається загальне його зменшення.

2. This dissertation deals with the investigation of the joint effect of thermal annealing, laser irradiation and doping on physicochemical properties of nanocomposites formed on the basis of nanodispersed TiO2, doped with Zr, Nb, Fe and nanoporous carbon. The interrelations have been determined between the conditions and modes of obtaining and modifying constituents of the composite and electrochemical process regularities in electrical energy storage and generation devices. The optimal conditions of laser modification when this material provides high specific capacity properties of lithium power sources have been found. It has been demonstrated that the specific capacity of the electrochemical system formed on the basis of the modified composite TiO2/C when the current is 1-5 mA is 15-50 times higher than the similar capacity for the primary composite, which shows the formation of the matrix with a considerable number of guest positions capable of substantially intensifying charging/discharging processes. Based on the overall tests, the influence of the intercalated Zr and Nb and the thermal annealing on the crystalline structure, surface morphology of TiO2 has been shown. It has been discovered that doping TiO2 with niobium provides anatase phase stability toward the temperatures of 1123 K. According to the results of X-ray analysis of TiO2 doped with zirconium, the content of rutile after annealing is ~ 30 %. This material is characterized by the porous structure with the specific area of 260 m2/g, which is by 40% bigger in comparison with the results obtained for TiO2 undoped and doped with niobium. With the help of the thermogravimetric method, it has been found that its content of water is up to 20% of its initial mass. According to the results of the ultraviolet spectroscopy, the width of the titanium dioxide bandgap decreases from 3.5 eV to 2.5 eV when TiO2 is doped with zirconium and annealed at the temperature of up to 1123 K respectively, the cause of which is appearance of energy levels in the TiO2 bandgap because of the formation of oxygen vacancies after annealing, which has been confirmed by the X-ray photoelectron spectroscopy. For the first time, the TiO2 doped with zirconium and niobium and annealed at 673 and 1123 K has been used as a cathode material in lithium power sources. The efficiency of combining these methods of modification in order to improve the intercalation of lithium ioniums into the titanium dioxide structure has been demonstrated. The value of specific energy characteristics of the lithium power sources has increased by 50% and 20% when TiO2 is doped with zirconium and niobium respectively with their subsequent annealing at 1123 K. It has been experimentally proved that the electrochemical intercalation of lithium ioniums into the rutile structure of magnesium fluoride is a two-stage

process. The first one involves filling the hollowness of structural channels in surface layers, accumulation of lithium metal on the surface; the second - filling free "guest" positions in the cathode matrix structure at the expense of lithium diffusion. The kinetics of lithium diffusion in the structure of MgF2 and MgF2/C has been studied. It has been determined that in the process of accumulating lithium intercalated by seleit matrix with the rutile structure, the diffusion coefficient changes in a non-monotone way depending on the established cathode-anode difference in potentials while its total reduction is observed.

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 ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Остафійчук Богдан Костянтинович
2. Ostafiychuk Bohdan Kostyantynovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

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. Рево Сергій Лукич

2. Рево Сергій Лукич

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

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. Стасюк Зиновій Васильович

2. Стасюк Зиновій Васильович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.04

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. Ільчук Григорій Архипович

2. Ільчук Григорій Архипович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.01

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.