Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U101869

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-12-2023

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Ректора Львівського національного університету імені Івана Франка від 08.01.2024 р. № 22

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мілашюс Вікторія Едуардівна
2. Viktoriia E. Milashius

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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: 20-12-2023

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 35.051.128_ID 3042

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: 53.49.03, 53.49.03.07, 53.49.07.09, 31.17.15

Тема дисертації:

1. Синтез сплавів систем Li–{B, Al}–{C, Si, Ge, Sn}, їхній фазовий склад, структура фаз, воденьсорбційні та електрохімічні властивості.

2. Synthesis of alloys in the Li–{B, Al}–{C, Si, Ge, Sn} system, their phase composition, phase structure, hydrogen sorption and electrochemical properties.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційну роботу присвячено дослідженню оптимізацій методу синтезу сплавів систем на основі літію; вивчення взаємодії літію з p-елементами III (B, Al) та IV (C, Si, Ge, Sn) груп; визначення кристалічної структури сполук; обчислення електронної структури окремих сполук; вивчення електрохімічних та воденьсорбційних властивостей окремих фаз. Досліджено ізотермічний переріз діаграми стану для системи Li–B–C при температурі 500 °C та проведено порівняння з ізотермічним перерізом діаграми стану при 400 °C, який був вивчений нами раніше. Для трьох нових тернарних сполук та однієї уточненої – Li1-0,98BC (СТ ZrBeSi, СП hP6, ПГ P63/mmc, a = 2,74736(2) Å, c = 7,0573(3) Å) характерні області гомогенності, що зумовлені включенням-вилученням літію з гетерокарбонових шарів, а також взаємозаміщенням між атомами карбону та бору. Сполуки Li1-0,96BC3 (СП hP6-1, ПГ P-6m2, a = 2,5397(2) Å, c = 7,5969(3) Å), Li1-0,94B2C2 (СП hP18-3, ПГ

P63/mmc, a = 2,5899(4) Å, c = 22,674(3) Å), Li2-1,97B1,97-2,03C1,03-0,97 (СП tP10, ПГ P-4m2, a = 4,1373(3) – 4,1402(2) Å, c = 7,1045(14) – 7,1060(12) Å) є представниками нових структурних типів. Частково досліджено ізотермічний переріз діаграми стану для системи Li–Al–C при температурі 400 °C та встановлено існування п'яти нових тернарних сполук: Li0,67-0,39Al0,33-0,61C0,17-0,085 (СТ NaCl, СП cF24, ПГ Fm-3m, a = 4,4541(5) Å); LiAl3Cx (СТ CaTiO3, ПГ Pm-3m, a = 4,003(2) Å); LiAlC3 (СТ CaTiO3, ПГ Pm-3m, a = 4,050(1) Å), кристалічна структура сполук LiAl2C і LiAlC2 □ невідома, ймовірно сполуки мають сталий склад. Досліджено ізотермічний переріз діаграми стану для системи Li–Al–B при температурі 400 °C та встановлено існування трьох нових тернарних сполук: LiAlB (СТ BaLiSi, СП hP12, ПГ P-6m, a = 3,0703(2) Å, c = 3,2848(3) Å); Li1,27Al2,73B (СТ F4N, СП cP5, ПГ Pm-3m, a = 4,049(1) Å); LiAl3Bx, x = 0,6 (СТ CaTiO3, ПГ Pm-3m, a = 4,042(1) Å), також підтверджено існування уже відомої сполуки LiAlB14 (СТ власний, СП oI164, ПГ Imma, a = 5,846(1), b = 8,149(2), c = 10,355(4) Å). У системі Li–Si–B синтезовано деякі сплави для дослідження можливості формування тернарних сполук. В областях багатих бором та вуглецем була детально досліджена система B–C та побудована уточнена подвійна діаграма стану. Електрохімічне делітування проведено для бінарних сполук системи Li–Al. Зразок Li50Al50 містив бінарну фазу LiAl, зразок Li60Al40 □ фазу Li3Al2, зразок Li69Al31 □ двофазний (фази: Li9Al4, Li3Al2), а також сполук цієї системи легованої бором. Для вивчення електрохімічного делітування були синтезовані LiAl3Cx (СТ CaTiO3, надструктура до AuCu3), Si- та Ge-стабілізовані фази з кристалічною структурою AuCu3. Фаза Li17Sn4 легована нанотрубками продемонструвала кращі електрохімічні властивості, ніж ця сама фаза легована бором. Воденьсорбційні властивості були досліджені для сплаву складу Li2AlB. Для низки сполук приведена інтерпретація хімічного зв'язку за допомогою результатів розрахунку електронної структури для шести сполук: Li9Al4, LiAl3B, ряду тернарних сполук в системі Li–B–C (Li2-1,97B1,97-2,03C1,03-0,97, Li1-0,96BC3, Li1-0,98BC), LiAl3C.

2. The dissertation is dedicated to the investigation of the optimization method for synthesizing alloys in lithium-based systems. The study includes the examination of lithium interaction with III (B, Al) and IV (C, Si, Ge, Sn) group p-elements, determination of the crystal structure of compounds, calculation of the electronic structure of individual compounds, and exploration of the electrochemical and hydrogen sorption properties of specific phases. The isothermal section of the state diagram for the Li–B–C system at 500 °C is analyzed and compared with the previously studied section at 400 °C. For three new ternary compounds and one refined compound (Li1-0.98BC, crystal system ZrBeSi, space group hP6, P63/mmc, a = 2.74736(2) Å, c = 7.0573(3) Å), characteristic regions of homogeneity are identified. These regions result from lithium inclusion-exclusion from heterocarbon layers and mutual substitution between carbon and boron atoms. Compounds Li1-0.96BC3 (space group hP6-1, P-6m2, a = 2.5397(2) Å, c = 7.5969(3) Å), Li1-0.94B2C2 (space group hP18-3, P63/mmc, a = 2.5899(4) Å, c = 22.674(3) Å), Li2-1.97B1.97-2.03C1.03-0.97 (space group tP10, P-4m2, a = 4.1373(3) – 4.1402(2) Å, c = 7.1045(14) – 7.1060(12) Å) represent new structural types. The isothermal section of the state diagram for the Li–Al–C system at 400 °C reveals the existence of five new ternary compounds. The crystal structures of LiAl2C and LiAlC2 compounds remain unknown, possibly having a stable composition. The isothermal section of the state diagram for the Li–Al–B system at 400 °C identifies three new ternary compounds, confirming the existence of the known compound LiAlB14. In the Li–Si–B system, alloys were synthesized to investigate the possibility of forming ternary compounds. The B–C system was extensively studied in boron- and carbon-rich regions, constructing a refined double state diagram. Electrochemical delithiation was conducted for binary compounds in the Li–Al system. Samples Li50Al50 contained the binary phase LiAl, Li60Al40 exhibited the phase Li3Al2, and Li69Al31 was two-phase (phases: Li9Al4, Li3Al2), with boron-doped compounds. Electrochemical delithiation was also performed for LiAl3Cx (crystal system CaTiO3, a superstructure to AuCu3), Si- and Ge-stabilized phases with the crystal structure of AuCu3. The phase Li17Sn4 doped with nanotubes demonstrated superior electrochemical properties compared to the boron-doped counterpart. Hydrogen sorption properties were investigated for the alloy with the composition Li2AlB. Interpretation of the chemical bonding is provided for six compounds Li9Al4, LiAl3B, LiAl3C and several ternary compounds in the Li–B–C system (Li2-1,97B1,97-2,03C1,03-0,97, Li1-0,96BC3, Li1-0,98BC) based on the results of electronic structure calculations.

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: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- 1. Pavlyuk, V., Milashys, V., Dmytriv, G., Ehrenberg, H. (2015). A new tetragonal structure type for Li2B2C. Acta Cryst. C, 71(1), 39-43.
- 2. Milashius, V., Pavlyuk, V., Kluzia, K., Dmytriv, G., Ehrenberg, H. (2017). LiBC3: a new borocarbide based on the grapheme and heterographene networks. Acta Cryst. C, 73, 984-989.
- 3. Milashius, V., Pavlyuk, V., Dmytriv, G., Ehrenberg, H. (2018). Phase equilibria and crystal structure relationships in the ternary Li–B–C system. Inorganic chemistry fronteirs, 5, 853-863.
- 4. Кордан, В., Мілашюс, В., Тарасюк, І., Павлюк, В. (2021). Електрохімічне делітування бінарних LiAl, Li3Al2, Li9Al4 та легованих бором фаз. Вісник Львівського університету. Серія хімічна, 62, 77-87.
- 5. Кордан, В., Мілашюс, В., Тарасюк, І., Павлюк, В. (2023). Електронна структура сполуки LiAl3Bx. Вплив бору на деінтеркаляцію літію. Вісник Львівського університету. Серія хімічна, 64, 64-72.
- 6. Мілашюс, В., Дмитрів, Г., Тарасюк, І., Павлюк, В. (2013). Структурні дослідження фаз системи Li–B–C. Зб. наук. праць XIV Наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2013”, Львів, Н85.
- 7. Milashius, V., Pavlyuk, V., Dmytriv, G., Ehrenberg, H. (2017). New hexagonal structure type of LiBC3. Зб. наук. праць XVI Наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2017”, Львів, Н20.
- 8. Milashius, V., Kordan, V., Pavlyuk, V., Dmytriv, G. (2018). Electrochemical delithiation of LiAl and Li3Al2 phases. Book Abs XXI Int. Sem. Phys. Chem. Solids, Częstochowa, 53.
- 9. Мілашюс, В., Кордан, В., Павлюк, В. (2018). Вплив бору на процес делітування фази Li9Al4-xBx. Тези допов. XX Укр. конф. неорган. хімії, Дніпро, 176.
- 10. Мілашюс, В., Кордан, В., Тарасюк, І., Дмитрів, Г., Павлюк, В. (2019). Електрохімічний синтез сполуки LiB25. Зб. наук. праць XVII Наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2019”, Львів, Н31.
- 11. Milashius, V., Kordan, V., Tarasiuk, I., Dmytriv, G., Pavlyuk, V. (2019). Influence of boron on the electrochemical delithiation of the LixAly phases. Coll. Abs. XIV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd., Lviv, 142.
- 12. Milashius, V., Kordan, V., Gubay, A., Tarasiuk, I., Dmytriv, G., Pavlyuk, V. (2020). Crystal and electronic structure of LiBxAl3. Book Abstr. III Int. (XII Ukr.) Scientific Conference for Students and Young Scientists “Chemistry Current Problems”, Vinnytsia, 55.
- 13. Milashius, V., Kordan, V., Tarasiuk, I., Pavlyuk, V. (2023). Synthesis and electronical delithation of Li17Sn4 doped by boron. Book Abs. III Int. (XVI Ukr.) Scientific Conference for Students and Young Scientists “Chemistry Current Problems”, Vinnytsia, 34.
- 14. Мілашюс, В., Кордан, В., Тарасюк, І., Дмитрів, Г., Павлюк, В. (2023). Синтез та фазовий склад композиту Li17Sn4 на основі та вуглецевих нанотрубок. Зб. наук. праць XIX Наук. конф. “Львівські хімічні читання – 2023”, Н30.
- 15. Milashius, V., Kordan, V., Pavlyuk, V. (2023). A compositional and structural refinements for Li–B–C phases. Coll. Abs. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd., Lviv, P25.
- 16. Milashius, V., Kordan, V., Tarasiuk, I., Pavlyuk, V. (2023). Electronic structure of LiAl3Cx compound and electrochemical delithiation of the related phases. Coll. Abs. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd., Lviv, P56.

Наукова (науково-технічна) продукція: технології; матеріали

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: № 0115U003257, № 0118U003609, № 0121U109766, № 0123U100599

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Павлюк Володимир Васильович

2. Volodymyr V. Pavlyuk

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1893-2706

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7005030450; Web of Science Researcher ID: I-9809-2014; https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=3X7GzzMAAAAJ

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. Гулай Любомир Дмитрович

2. Lubomir D. Gulay

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3495-5027

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7004458695; Web of Science Researcher ID: P-9761-2019; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=xeAQq2cAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, буд. 13, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Созанський Мартин Андрійович

2. Martyn A. Sozanskyi

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1057-9928

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 56912408200; Web of Science Researcher ID: R-6748-2018; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=uBmc064AAAAJ

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. Заремба Оксана Іванівна

2. Oksana I. Zaremba

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3179-845X

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 35732911400; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=0k9-ikEAAAAJ

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. Демченко Павло Юрійович

2. Pavlo Y. Demchenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3717-6742

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 55397953000; Web of Science ResearcherID: L-9333-2017; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=dUBArQYAAAAJ

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	Гладишевський Роман Євгенович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Гладишевський Роман Євгенович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Жак Ольга Володимирівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна

