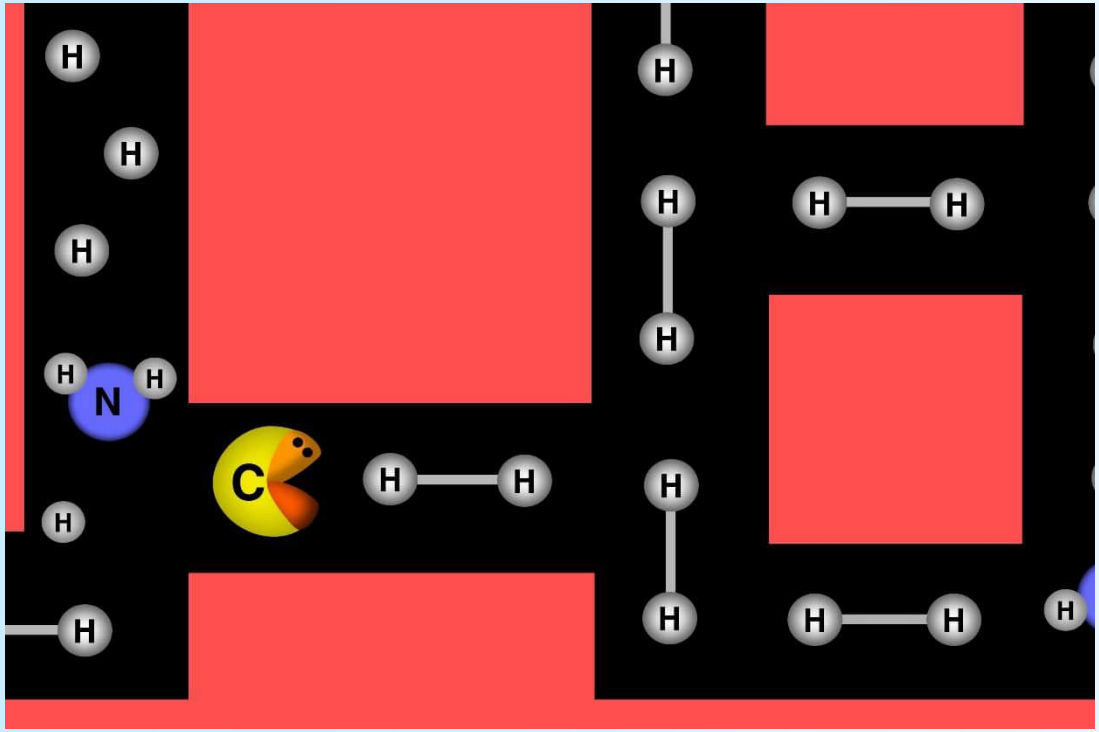
Від МАНу до Лювану:
потрохи про освіту, науку і людські контакти



Institute of Condensed Matter and Nanosciences
Louvain-la-Neuve, Belgium

Yaroslav Filinchuk

www.filinchuk.com

Лекція по запрошенню від Малої Академії Наук, Львів, 25 червня 2020

8-11 клас (1991-1995): **золоті роки у Львові**

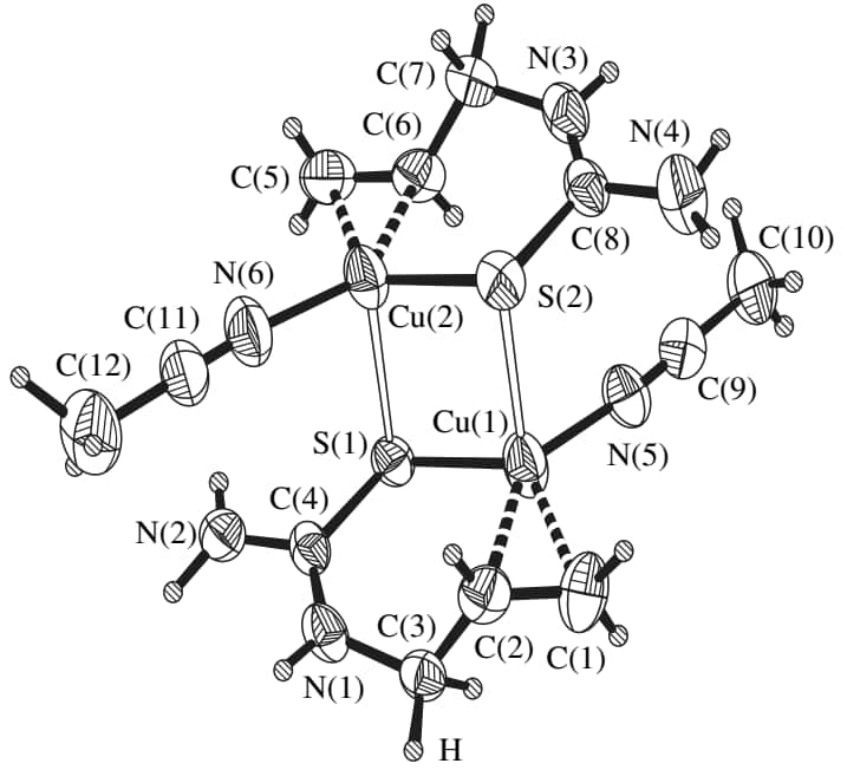
- **Мала Академія Наук**, всі 4 роки – лекції (знайомство з викладачами), початок наукової роботи, обласні і всеукраїнські конкурси робіт, літні табори, командні конкурси (Одеса)

- **Львівський фіз.-мат. ліцей**, 1992-1995 – дізнався через табір МАН! Чудова атмосфера серед учнів і викладачів, друзі назавжди. Випустився ще до створення хімічної секції

- **Хімічні олімпіади**, 1991-1995 – зв’язок з факультетом (обласні етапи, підготовка до всеукраїнських), зв’язок з учнями і викладачами зі всієї України (всеукраїнські етапи: Одеса, Донецьк, Чернігів, Сімферополь), 2 підготовки до міжнародного етапу (Донецьк), 2 тиждні з командою в Пекіні, Соросівська олімпіада (Київ), потім – 3 студентські (Харків)...

Студент хімічного факультету (1995-2000)

Навчання та **наукова робота**, дякую Мар’яну Григоровичу Миськіву (разом на протязі 9 років!) за величезну підтримку, Фонду відродження/Соросу – за 4 стипендії

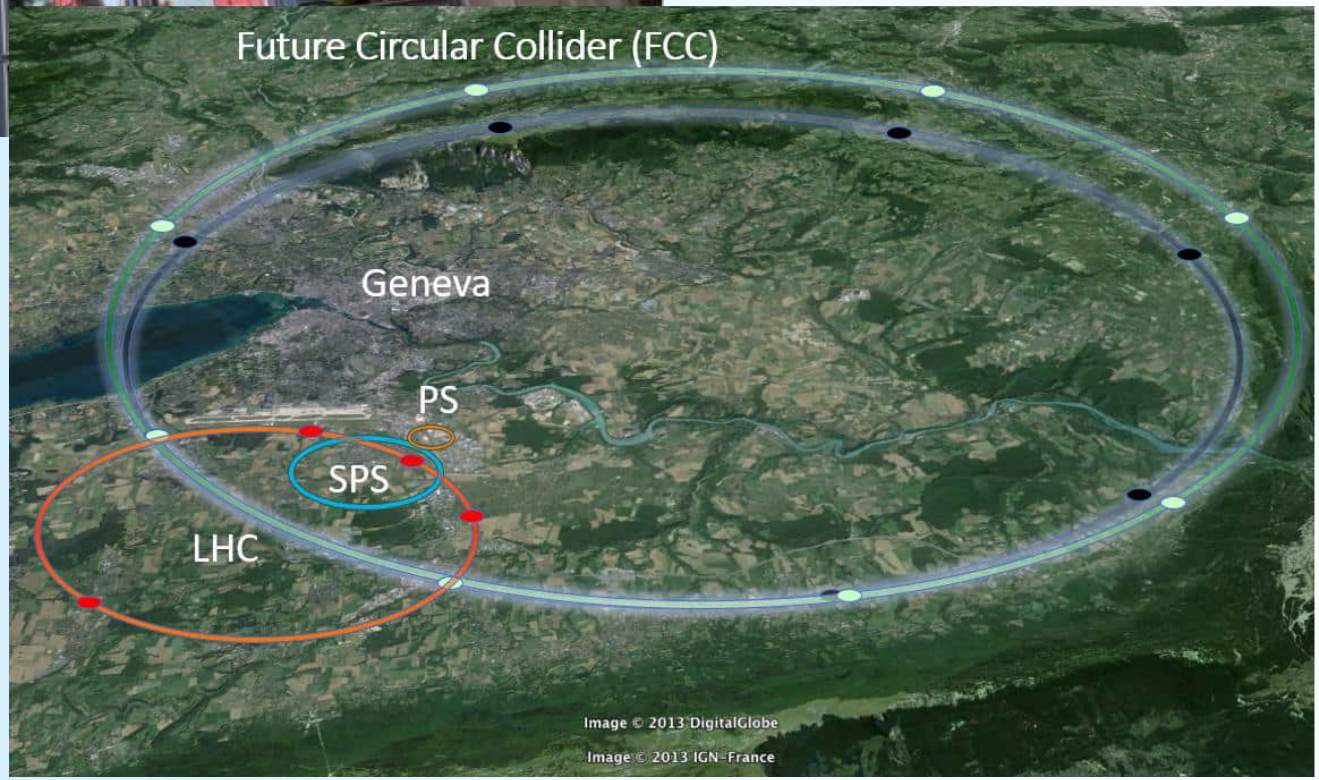


Комплекси міді (приклад з 1996 р.) – координаційна хімія: повернувся в 2006 через пористі сполуки.

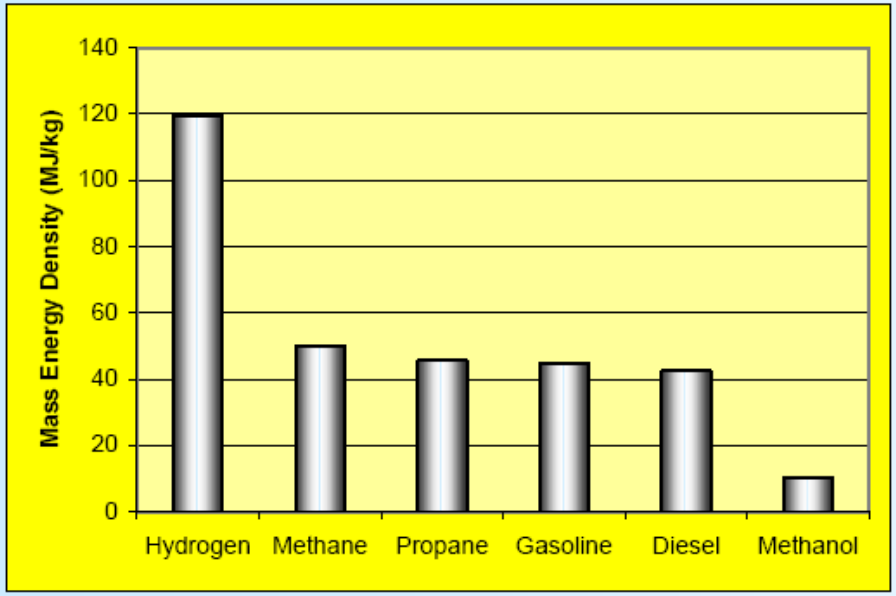
Структурний аналіз (рентгенівським промінням) і структурна хімія – спеціалізація КНХ!

Uni. Genéve: 2000-2005, заочна асп. Львів 2000-2002

Klaus Yvon
Radovan Černý

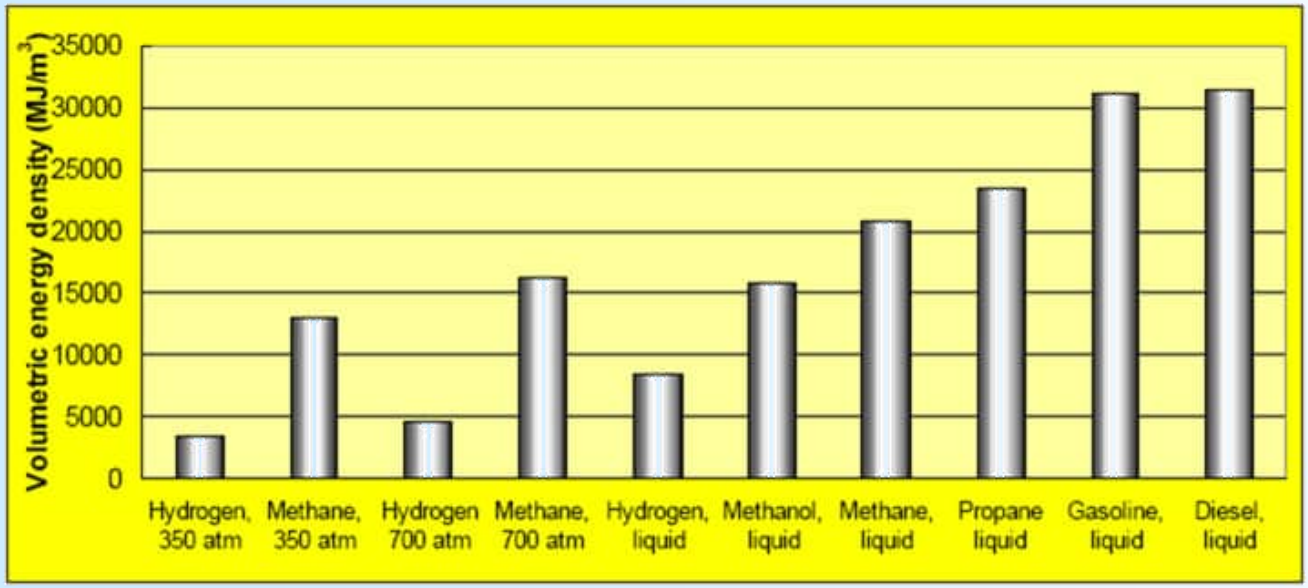


Energy density

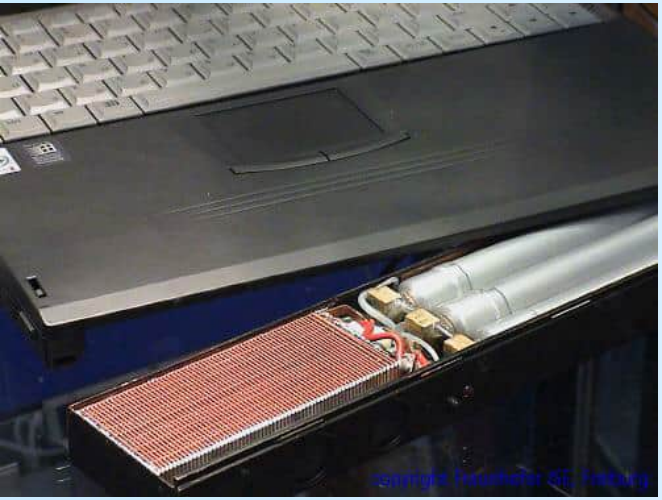


Lithium-ion batteries up to 1 MJ/kg

For practical applications hydrogen storage density has to be increased



Mobile applications



Residential systems

H2One, Toshiba

Kyushu Resort Hotel

one-week's supply of electricity and hot water for 300 people using CO_2-free hydrogen energy

Enhancing the el. grid

MYRTE, Corsica

$Sun \rightarrow H_2 \rightarrow$ electricity to the grid on demand

Hydrogen storage: main classes

Intermetallic solid solutions & compounds: $LaNi_5$-H, FeTi-H, Mg_2FeH_6

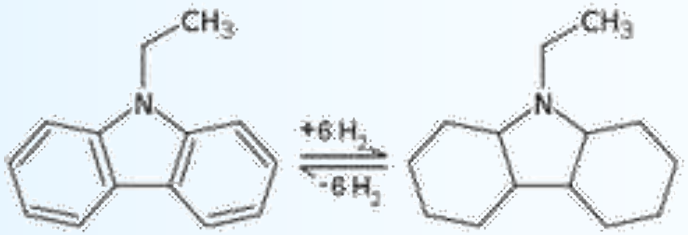
Amides: $LiNH_2 + 2LiH \leftrightarrow Li_3N + H_2$

Alanates: $NaAlH_4 \leftrightarrow NaH + Al + H_2$
(Ti-catalyzed reversibility)

Borohydrides: $LiBH_4 + MgH_2 \leftrightarrow MgB_2 + LiH + H_2$
(reactive hydride composite)

Catalyzed hydrolysis: $NaBH_4 + H_2O \rightarrow NaBO_2 + H_2$

Liquid organic hydrogen carriers



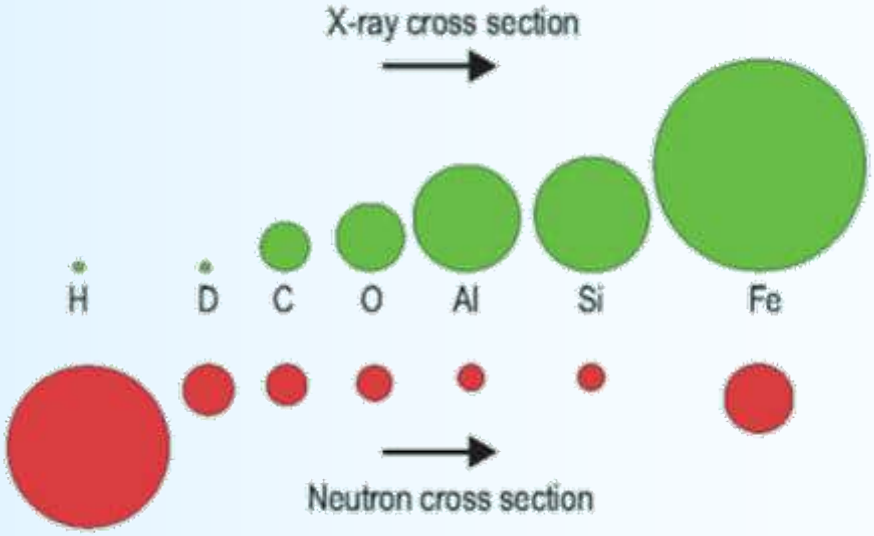
Hydrogen in metals

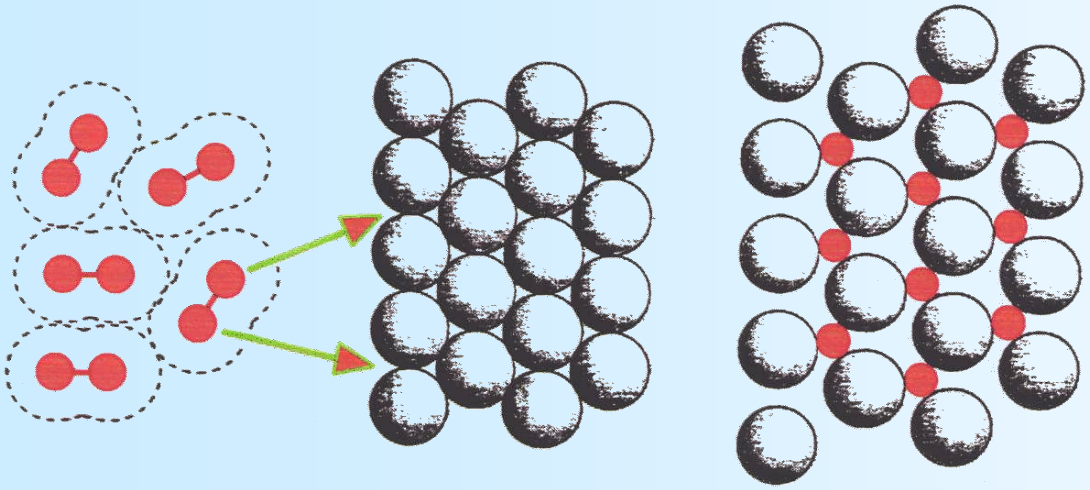
$LaNi_5H_6$

« Geometric » model

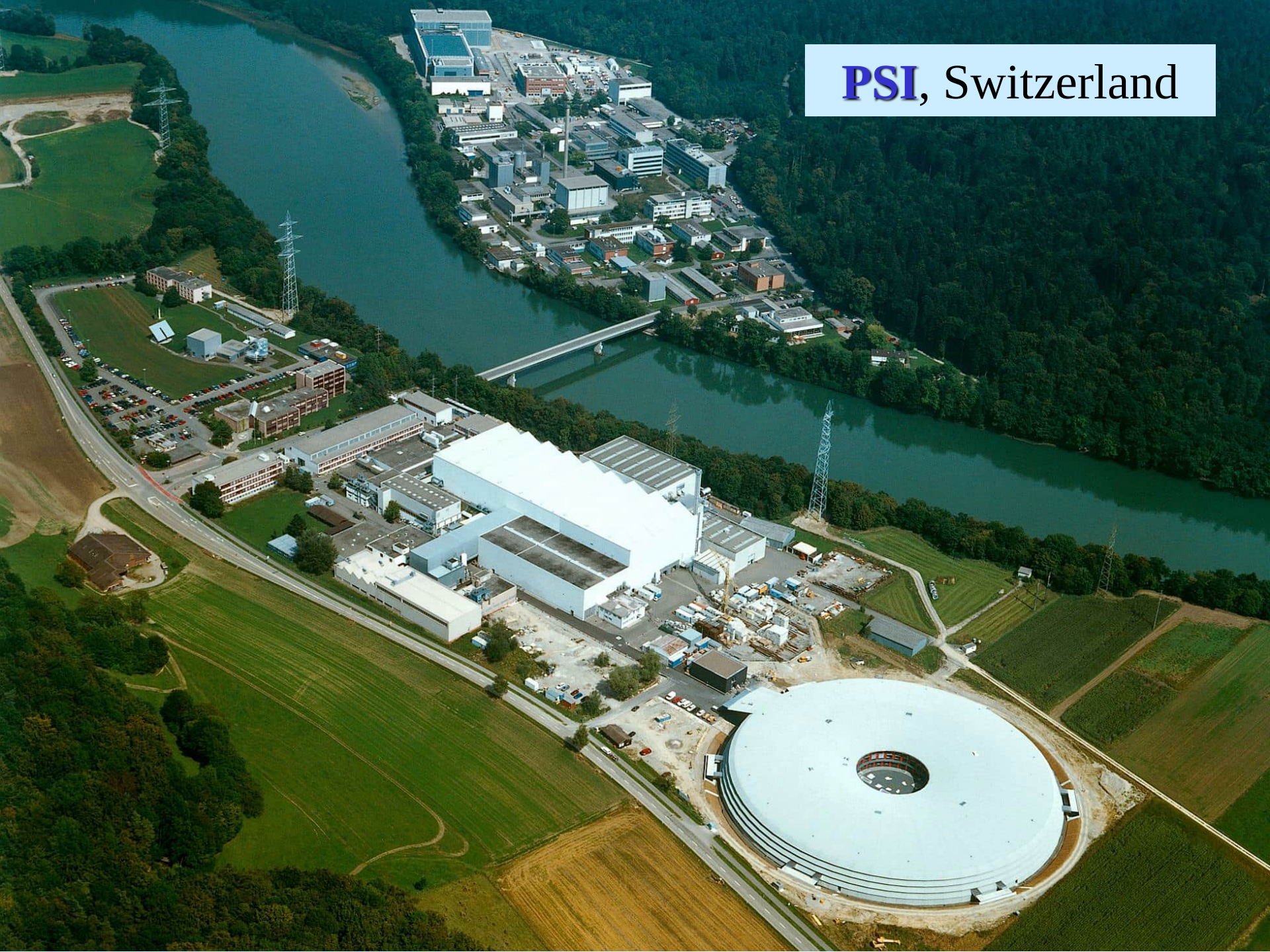
(Westlake, 1983)

- atoms are rigid spheres
- "interstitial" hole size > 0.38Å
- H-H > 2.1 Å (H-H blocking)





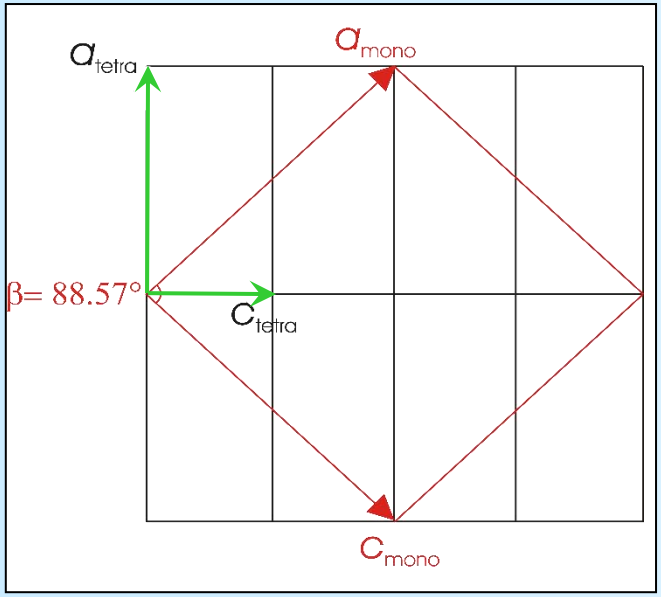
Actually, there is a rich chemistry of M-H interactions

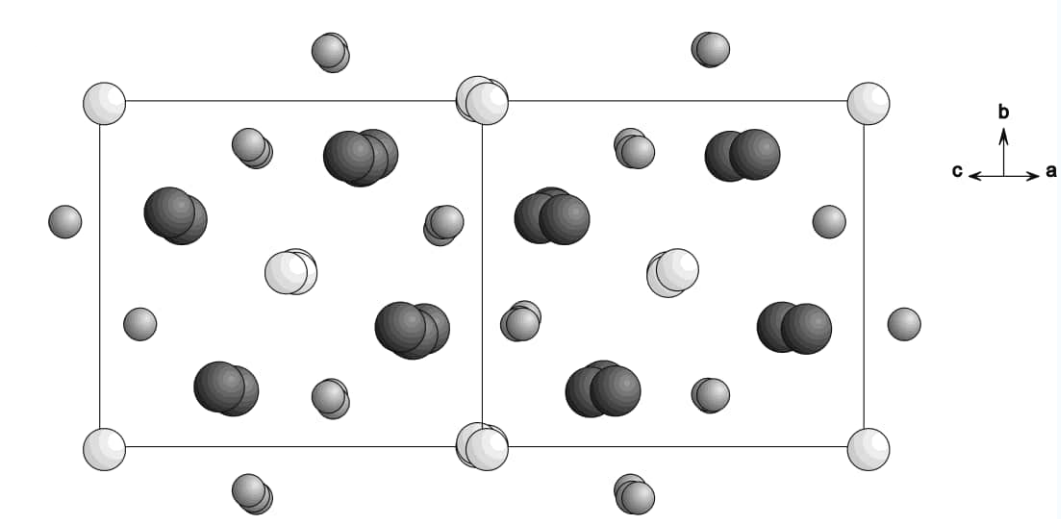

PSI, Switzerland

Swiss neutron spallation source **SINQ** at **PSI**

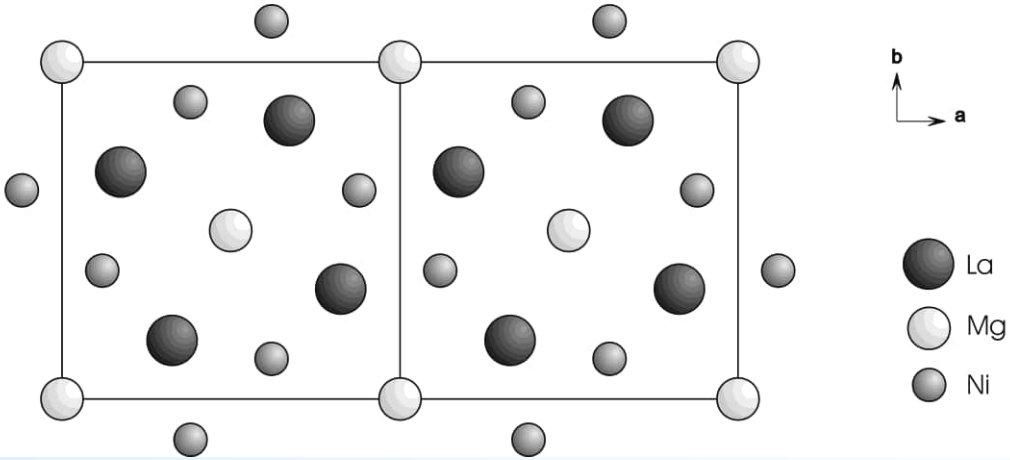
Synchrotron: real structure

La_2MgNi_2–D_2





Metal atom shifts < 0.65 Å



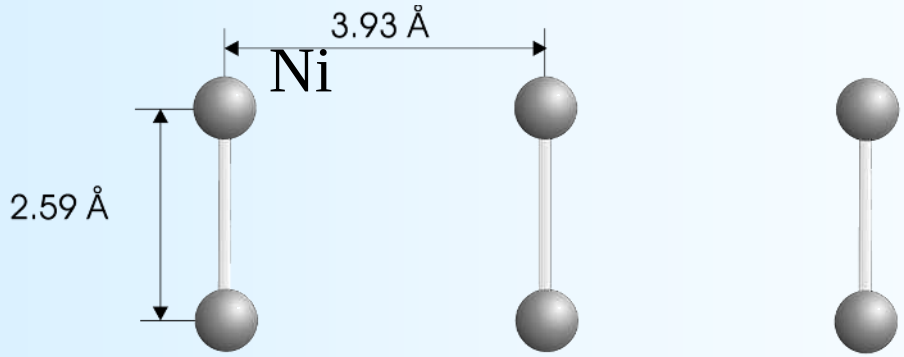
La_2MgNi_2	$La_2MgNi_2H_8$
Tetragonal	**Monoclinic**
7.64	11.84
3.94 Å	7.82
	11.96 Å
	92.78 °

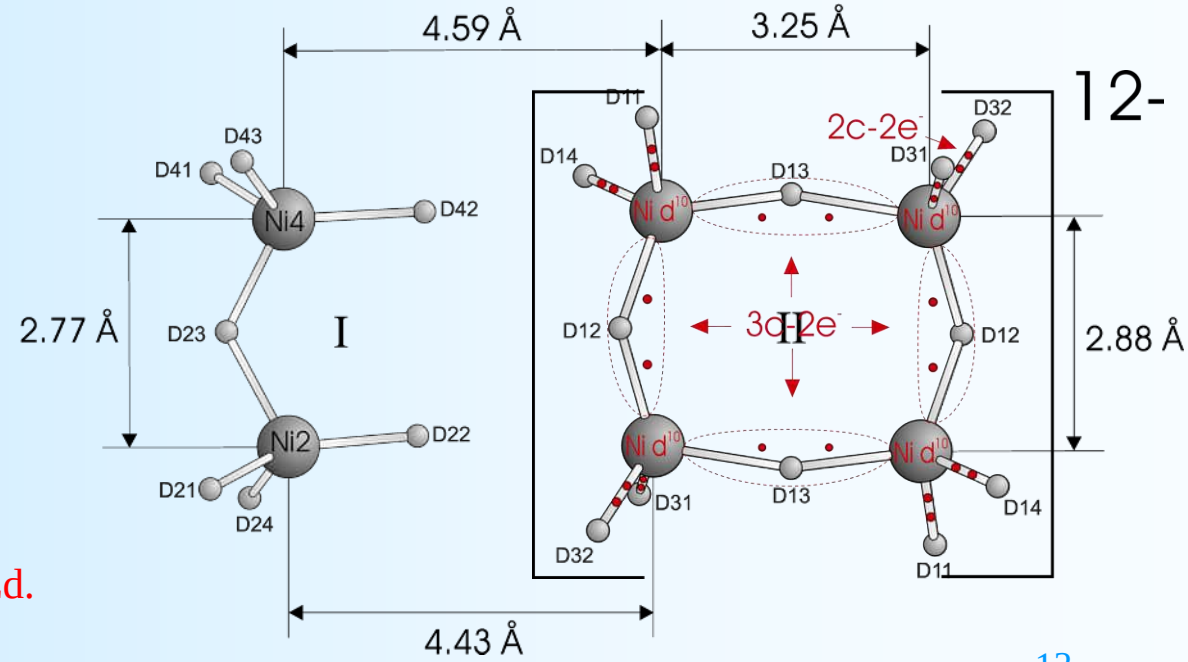
Metal-hydride complexes $[Ni_2H_7]^{7-}$ & $[Ni_4H_{12}]^{12-}$

La_2MgNi_2

H_2

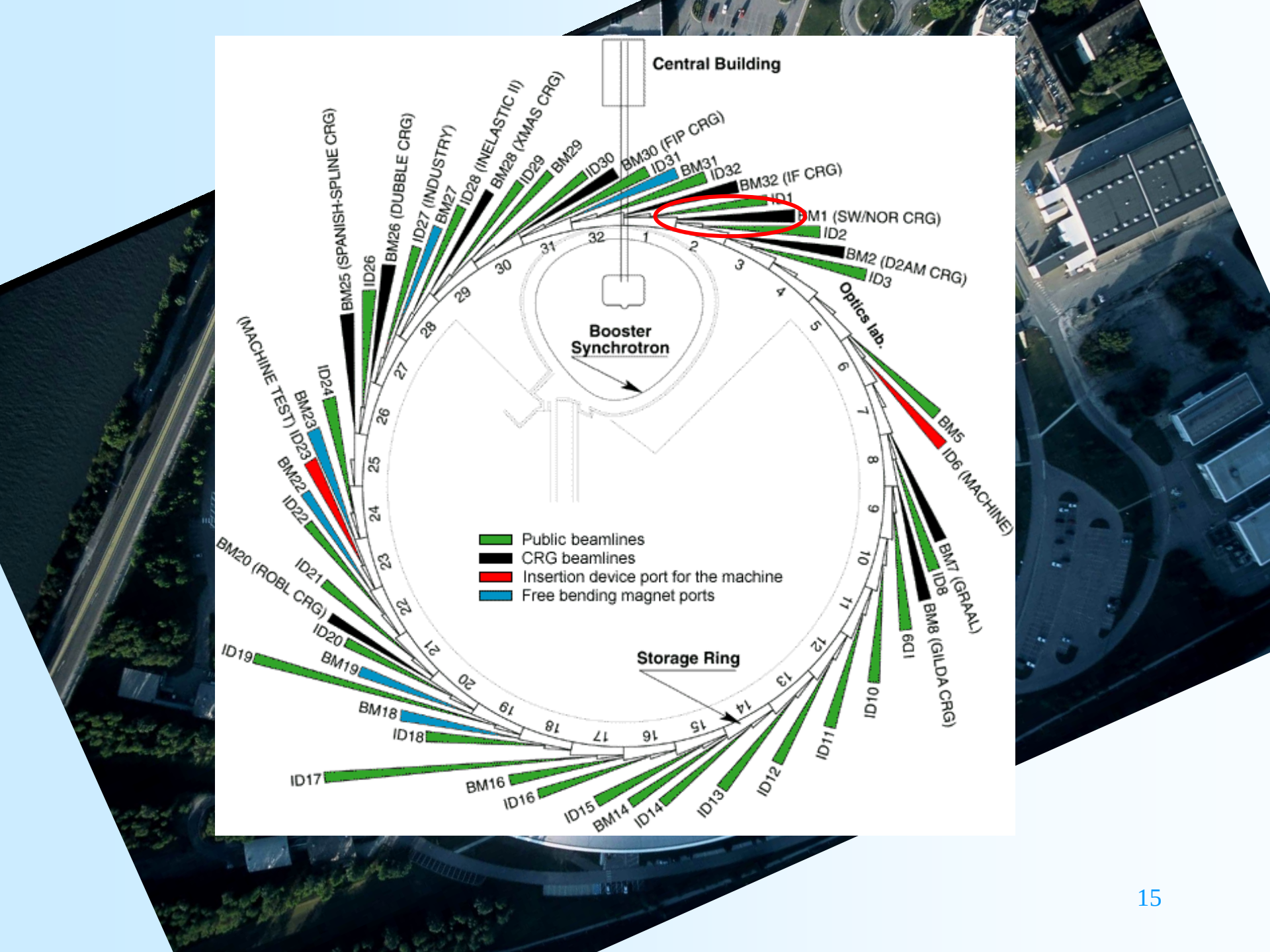
$La_2MgNi_2H_8$



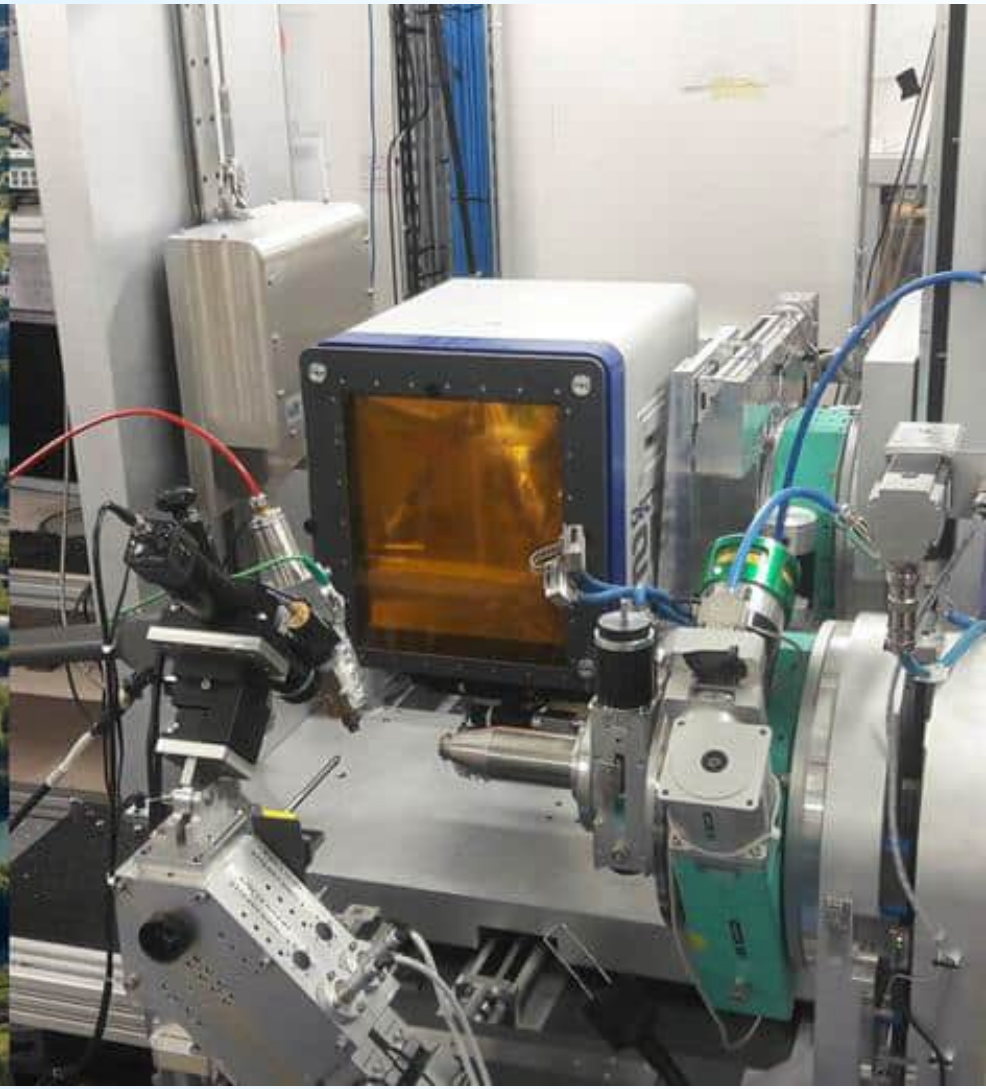


Chotard *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. 45 (2006) 7770

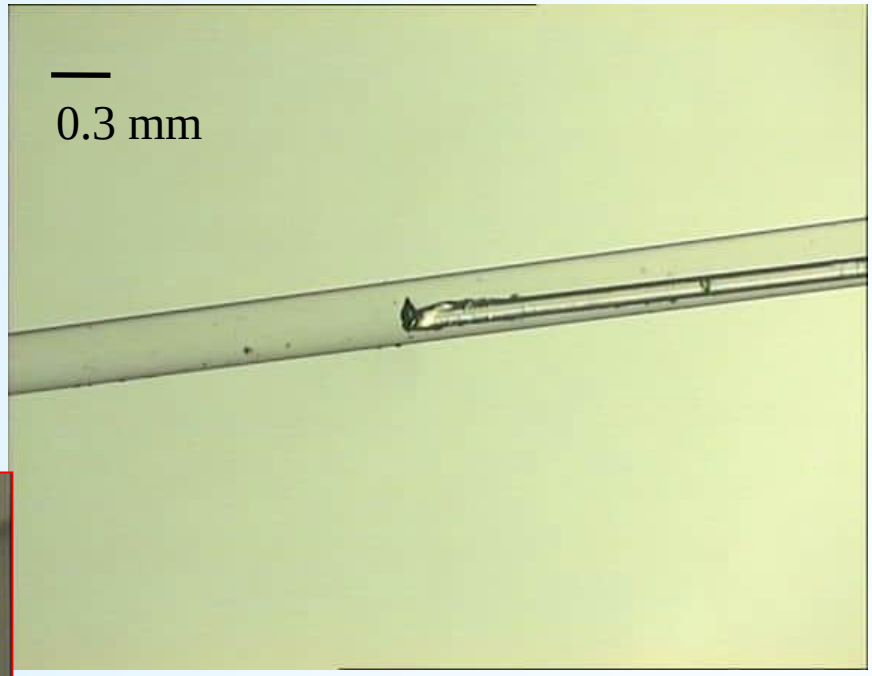
European Synchrotron, ESRF: 2006-2010

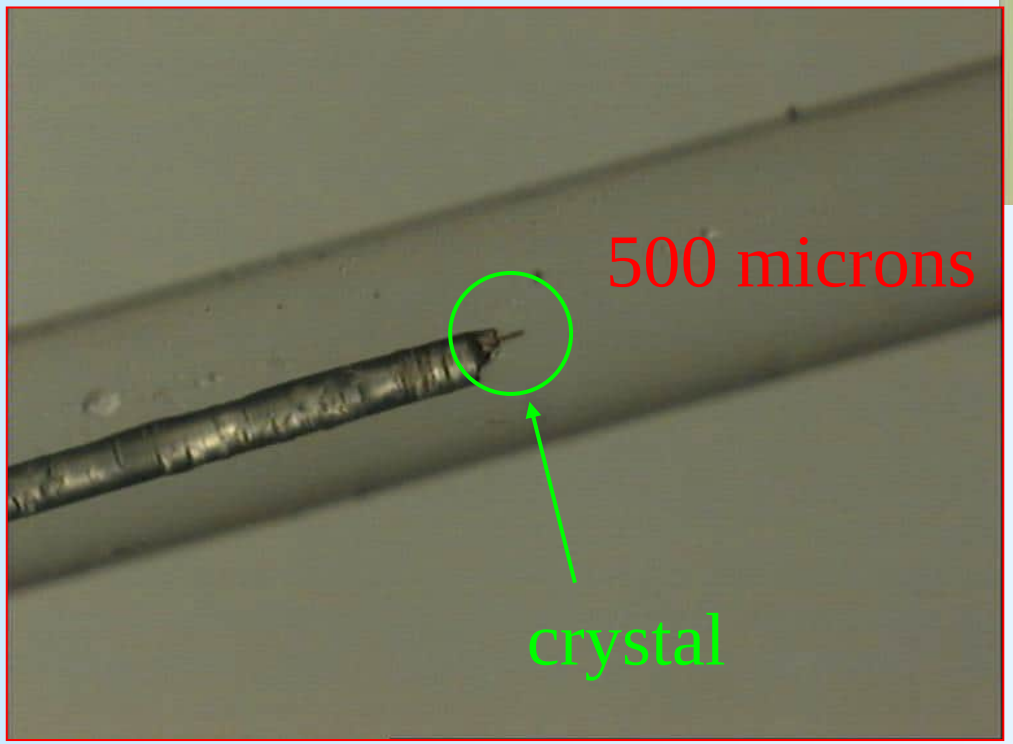

Central Building
Booster Synchrotron
Storage Ring
Optics lab.
Public beamlines
CRG beamlines
Insertion device port for the machine
Free bending magnet ports
BM1 (SW/NOR CRG)
ID1
ID2
BM2 (D2AM CRG)
ID3
BM5
ID6 (MACHINE)
BM7 (GRAAL)
ID8
BM8 (GILDA CRG)
ID9
ID10
ID11
ID12
ID13
ID14
BM14
ID15
ID16
BM16
ID17
ID18
BM18
BM19
ID19
ID20
BM20 (ROBL CRG)
ID21
ID22
BM22
ID23
BM23
(MACHINE TEST) ID23
ID24
BM25 (SPANISH-SPLINE CRG)
ID26
BM26 (DUBBLE CRG)
ID27 (INDUSTRY)
BM27
ID28 (INELASTIC II)
BM28 (XMAS CRG)
ID29
BM29
ID30
BM30 (FIP CRG)
ID31
BM31
ID32
BM32 (IF CRG)

SNBL / ESRF – Pilatus 2M detector



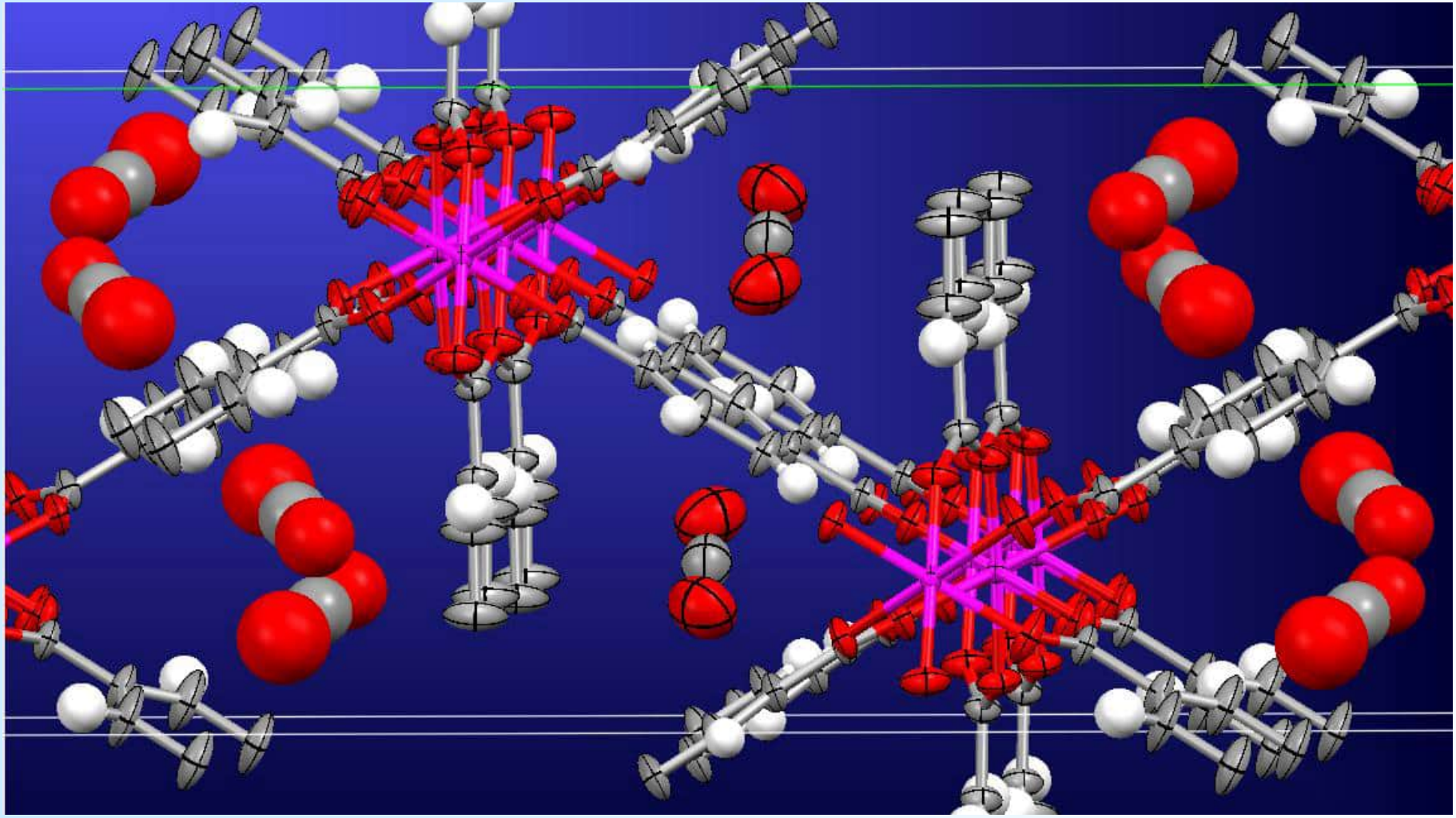
Single crystals loaded with a gas





Adsorption of CO_2 T = 231 K

R_1 = 5.9%



Two gas molecules located

caboxylic-O…CO_2 interaction

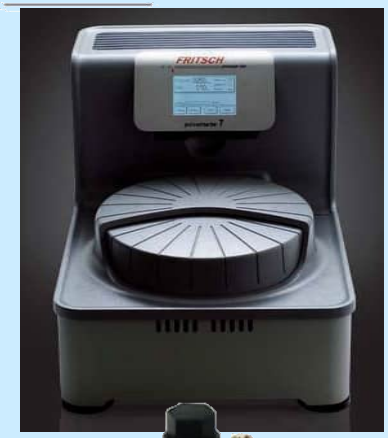
*Université catholique de Louvain (now **UCLouvain**)* 2011-now

Немає вступних екзаменів!

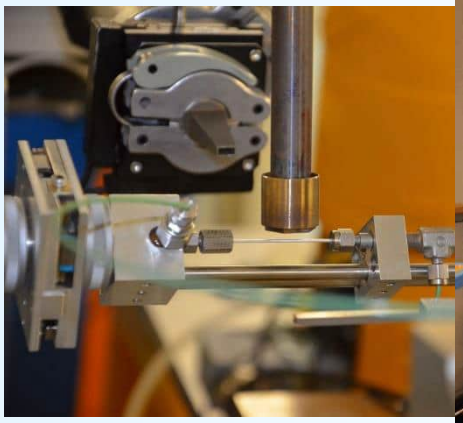
UCL Université catholique de Louvain

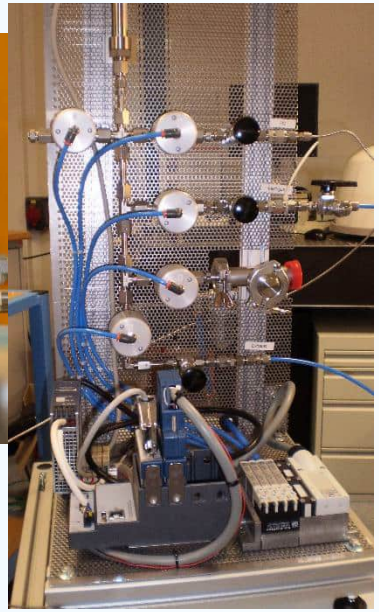
IMCN Institut de la matière condensée et des nanosciences

TGA/DSC-MS under Ar



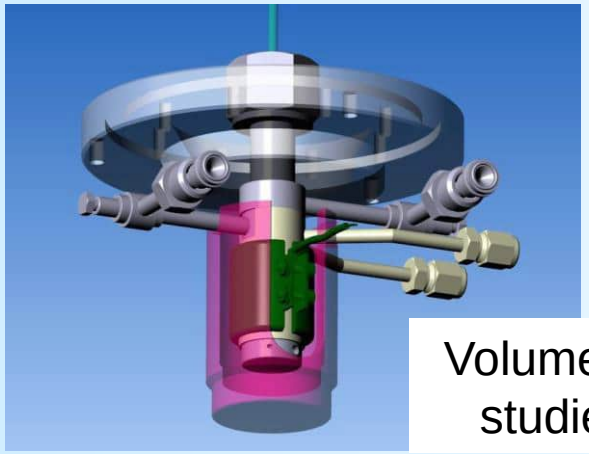
Inert atmospheres





Diffraction under practical conditions: P & T

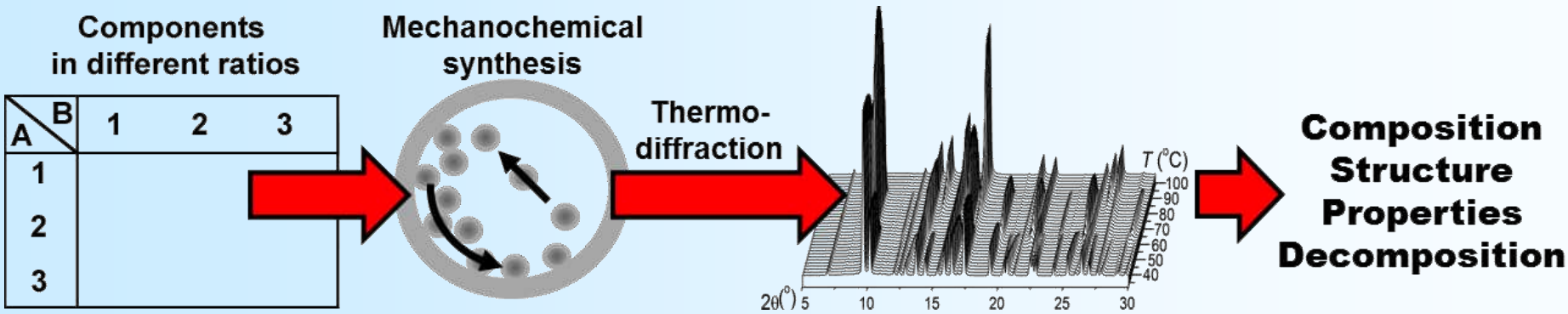
Mechno-chemical and wet syntheses



Volumetric studies

Synchrotron

Synthetic screening & fast characterization



Angew. Chem. Int. Ed. **2012**, 51, 3582.

T : 70-80 °C

$$2\ KCd(BH_4)_3 \rightarrow K_2Cd(BH_4)_4 + Cd(BH_4)_2$$

$$Cd(BH_4)_2 \rightarrow Cd + B_2H_6 + H_2$$

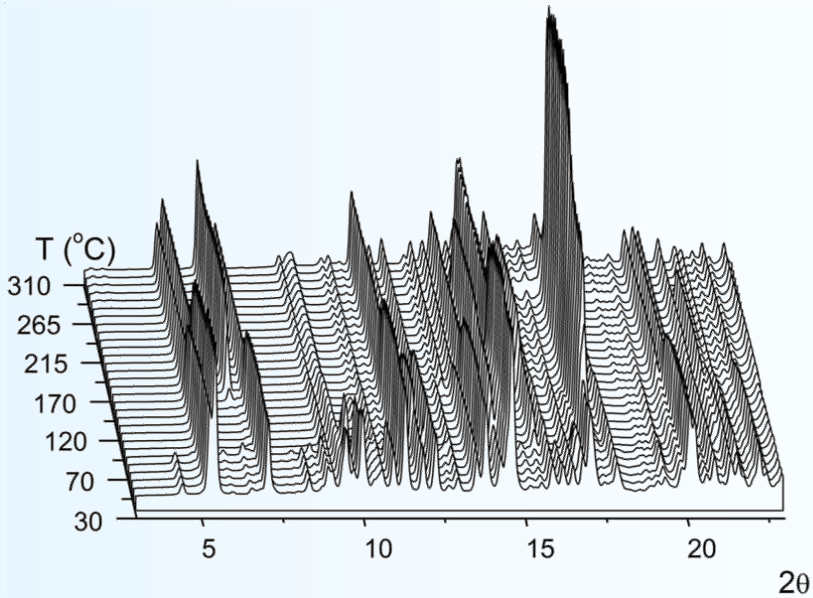
T : 80 – 90 °C

$$K_2Cd(BH_4)_4 \rightarrow Cd + B_2H_6 + H_2 + KBH_4$$

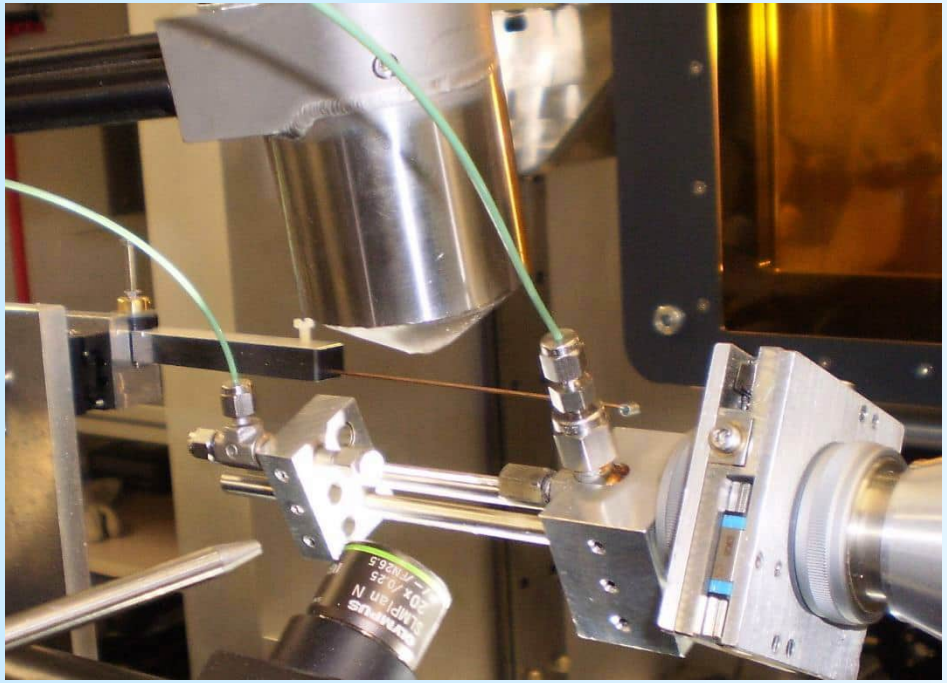
T : 160 – 170 °C

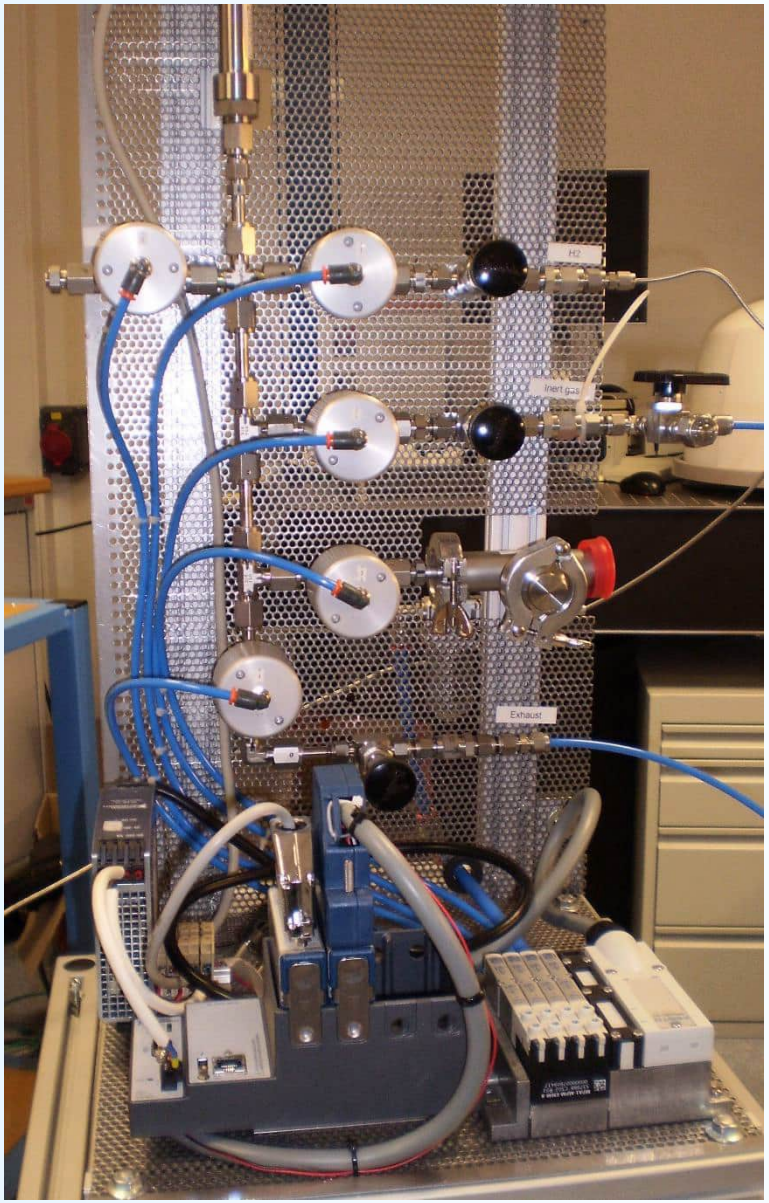
$$KCdCl_3 + 2\ KBH_4 \rightarrow Cd + B_2H_6 + H_2 + 3KCl$$

$$KCdCl_3 + 3KCl \rightarrow K_4CdCl_6$$



Automated gas dosing





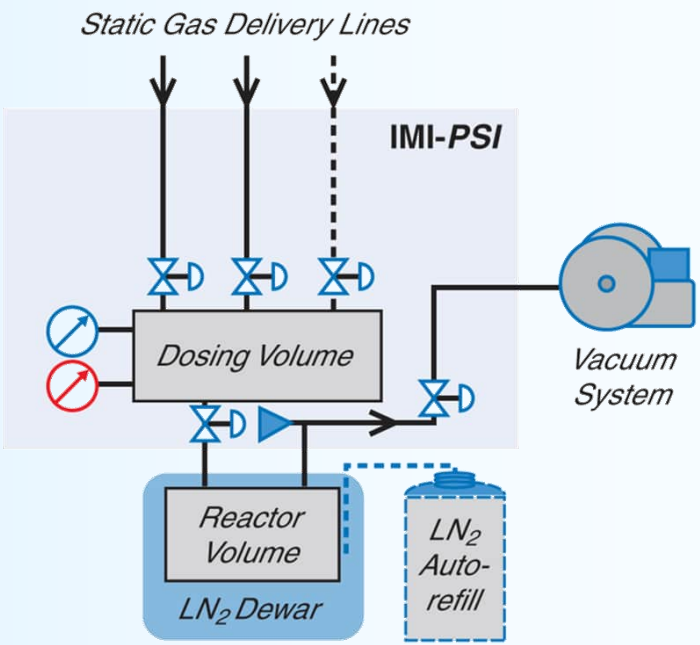
Lab: Mo rotating anode, focusing mirror, IP detector, gas + cooler/heater

Synchrotrons: SNBL/ESRF, MS/SLS(PSI), ID15/ESRF, I11/Diamond

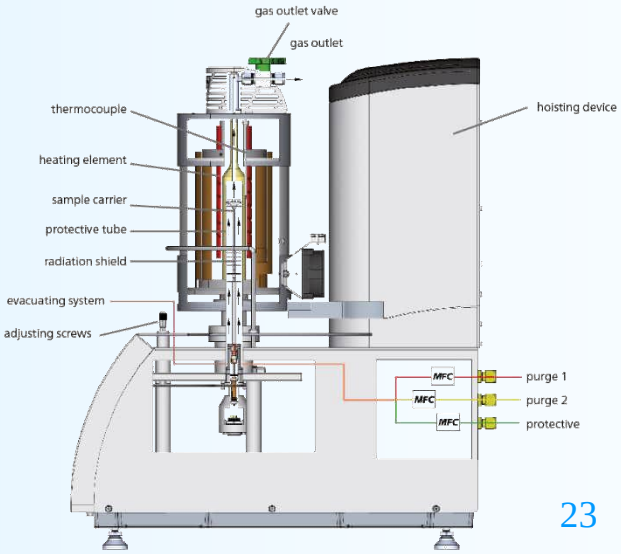
Neutrons: NIST, HRPT/SINQ(PSI), E9/Berlin

Other important techniques

- Volumetric (Sievert's) measurements P-C-T, thermodynamics, kinetics



- TGA/DSC-MS (in Ar atm.): mass, heat, desorbed gasses



Mill-XRD

Milling followed by diffraction

With SLS

research papers

Appl Cryst JAC JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY

ISSN 1600-5767

3D-printed jars for ball-milling experiments monitored *in situ* by X-ray powder diffraction

Nikolay Tumanov,[a,b] Voraksmy Ban,[a,c] Agnieszka Poulain[d] and Yaroslav Filinchuk[a]*

[a]Institute of Condensed Matter and Nanosciences, Université catholique de Louvain, place L. Pasteur, Louvain-la-Neuve, 1348, Belgium, [b]Department of Chemistry, University of Namur, rue de Bruxelles 61, Namur, 5000, Belgium, [c]MS Group, Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, Villigen – PSI, 5232, Switzerland, and [d]European Synchrotron Radiation Facility, 71 avenue des Martyrs, CS 40220, Grenoble Cedex 9, 38043, France. *Correspondence e-mail:

Received 5 April 2017
Accepted 4 May 2017

analytical chemistry

Article

Cite This: *Anal. Chem.* 2017, 89, 13176–13181

pubs.acs.org/ac

Innovative *in Situ* Ball Mill for X-ray Diffraction

Voraksmy Ban,[†] Yolanda Sadikin,[‡] Michael Lange,[†] Nikolay Tumanov,[§,∥] Yaroslav Filinchuk,[§] Radovan Cerny,[‡] and Nicola Casati*,[†]

[†]Swiss Light Source, Paul Scherrer Institut, 5232 Villigen PSI, Switzerland

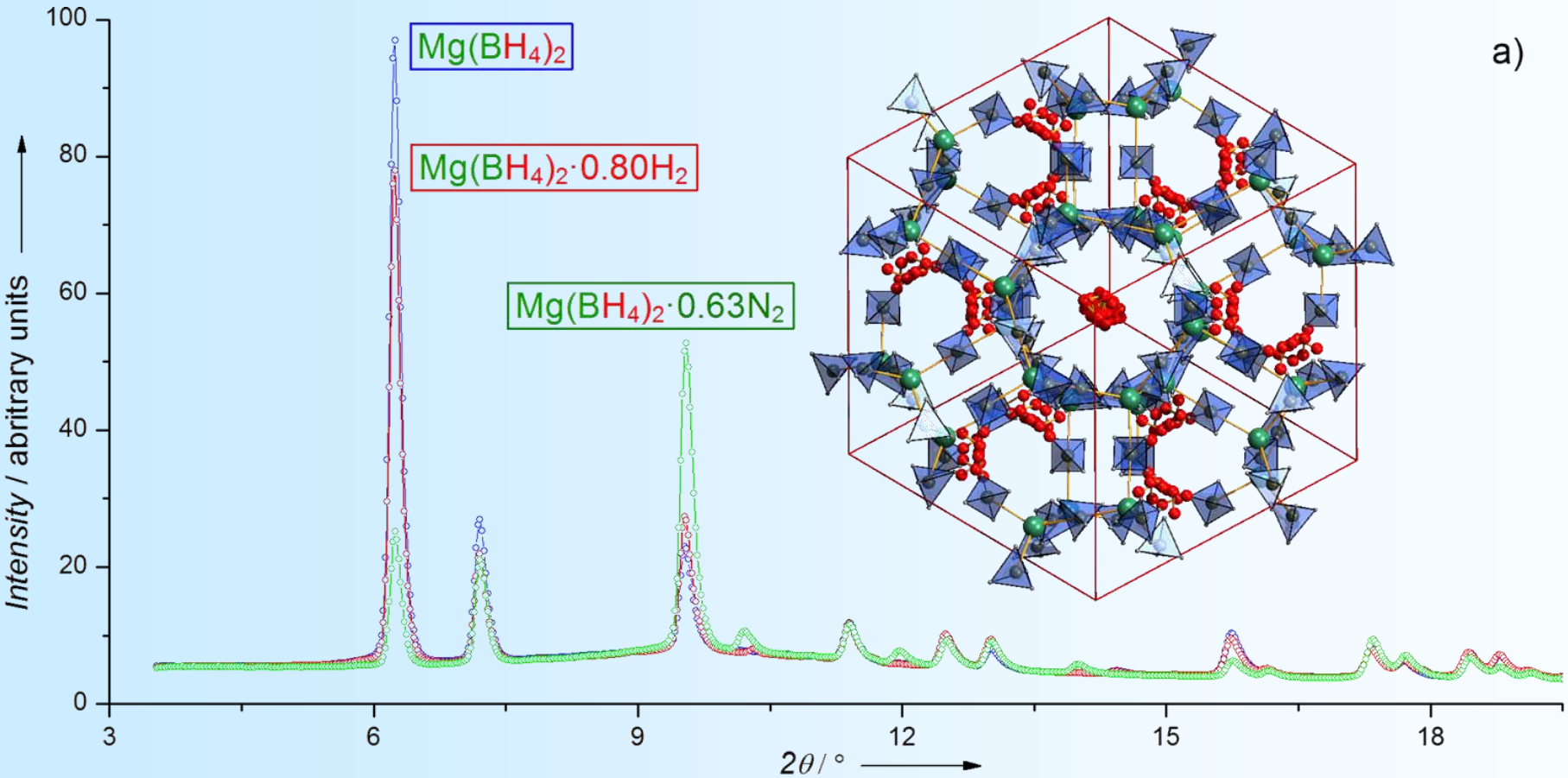
[‡]Laboratory of Crystallography, DQMP, University of Geneva, quai Ernest-Ansermet 24, 1211 Geneva, Switzerland

[§]Institute of Condensed Matter and Nanosciences, Universite catholique de Louvain, place L. Pasteur 1, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgium

[∥]Department of Chemistry, University of Namur, rue de Bruxelles 61, 5000 Namur, Belgium

γ-$Mg(BH_4)_2$

Thermodynamics and kinetics of gas adsoption from diffraction data



Уроки з мого досвіду

- **Освоїти щось складне-потрібне-цікаве**, що – відомо стає при спеціалізації (IT у всіх на слуху, але є і кращі можливості)
- **Наукова кар'єра - міжнародна**, це дає унікальну експертизу, контакти, друзів, купу подорожів, формує «людину світу» / європейця / франкофона / т.п.
- **Використовувати здобутки**: не міняти різко тему чи лабораторію, має бути логічне продовження, довгі контракти
- **Бути чесними з людьми**, світ малий, все «повернеться». Людський характер цінується не менше наукових здобутків