

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U032727

Державний реєстраційний номер: 0123U103492

Відкрита

Дата реєстрації: 03-12-2024



1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Газове та електрохімічне гідрування сплавів. Встановлення складу та структури гідридів. Встановлення кінетичних та термодинамічних параметрів утворення гідридів. Рекомендації щодо практичного використання.

Початок етапу: 01-2024

Закінчення етапу: 12-2024

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070987

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Телефон: 380322616048

E-mail: zag_kan@lnu.edu.ua

WWW: <http://www.lnu.edu.ua>

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070987

Адреса: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380322616048

E-mail: zag_kan@lnu.edu.ua

WWW: <http://www.lnu.edu.ua>

Назва організації: Національний фонд досліджень України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 42734019

Адреса: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442981622

Телефон: 380442981622

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 22010.40

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 2242.808 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Метал-гідриди на основі модифікованих сплавів магнію для сучасних високоемних систем накопичення водню

Назва роботи (англ)

Metal hydrides based on modified magnesium alloys for modern high-capacity hydrogen storage systems

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження – магнійвмісні інтерметаліди для систем накопичення, зберігання та транспортування водню, та електроди металогідридних хімічних джерел енергії. Предмет дослідження – фазові рівноваги в магнійвмісних системах, кристалічні структури сполук, що утворюються в цих системах, їхні гідрогенсорбційні та електрохімічні властивості. Мета роботи – створення нових високотехнологічних матеріалів для систем генерування, зберігання та транспортування водню на основі запропонованої концепції максимального розупорядкування високоентропійних інтерметалічних фаз та структурного модифікування, які забезпечать високу сорбційну ємність систем накопичення водню та циклічну стабільність електродів металогідридних акумуляторів. Вперше проведено систематичне дослідження магнійвмісних сплавів з метою створення гідрогенсорбційних матеріалів для систем накопичення, зберігання та безпечного транспортування водню, а також виготовлення електродів для металогідридних хімічних джерел електричної енергії. Гідрогенсорбційна ємність розроблених металгідридів із кімнатною температурою десорбції сягає 1,8 ваг. %, що на 10–15 % перевищує ємність аналогів (LaNi₅), а собівартість є нижчою. Гідрогенсорбційна ємність розроблених комплексних гідридів сягає 9,6 ваг. %, а температура десорбції є на 50–80 °С нижчою у порівнянні із магнієм (360 °С). Питома енергоємність металогідридних електродів знаходиться в межах 170–180 Вт·год/кг. Розроблені матеріали переданні для тестування щодо можливого практичного впровадження до Фізико-механічного Інституту НАН України ім. Г. В. Карпенка. У межах НДР планується розробка навчального посібника «Хімічні джерела електричної енергії». Дані доробки призначені для систем накопичення та зберігання водню, як джерела енергії, а також виготовлення електродів для металогідридних акумуляторів.

Реферат (англ)

The object of research is magnesium-containing intermetallics for hydrogen sorption, storage and transportation systems, and electrodes of metal hydride chemical energy sources. The research subject is phase equilibrium in magnesium-containing systems, crystal structures of compounds formed in these systems, their hydrogen sorption and electrochemical properties. The work aims to create new high-tech materials for hydrogen generation, storage, and transportation systems based on the proposed concept of the maximum ordering of high-entropy intermetallic phases and structural modification, which will ensure the high sorption capacity of hydrogen storage systems and cyclic stability of electrodes of metal hydride batteries. For the first time, a systematic study of magnesium containing alloys was carried out to create hydrogen sorption materials for systems of accumulation, storage, and safe transportation of hydrogen, as well as the manufacture of electrodes for metal-hydride chemical sources of electrical energy. The hydrogen sorption capacity of the developed metal-hydrides with a room desorption

temperature reaches 1.8 % by weight, which is 10-15 % higher than the capacity of analogs (LaNi₅), and the cost is lower. Hydrogen sorption capacity developed complex hydrides reaches 9.6 wt. %, and the desorption temperature is 50-80 °C lower compared to magnesium (360 °C). The specific energy intensity of metal-hydride electrodes is in the range of 170- 180 Wh/kg. Implementation of the results of SRW. Materials have been developed for testing for possible practical implementation at the Institute of Physics and Mechanics of the National Academy of Sciences of Ukraine G.V. Karpenko. A textbook called "Chemical Sources of Electrical Energy" is planned to be developed within the research work framework. These improvements are intended for hydrogen storage and storage systems as an energy source and the manufacture of electrodes for metal hydride batteries.

Індекс УДК: 546, 621.18,002.3-034, 620.22, 548 , 544.6

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.17.15, 55.36.09.29, 81.09, 31.15.17, 31.15.33

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Наукові публікації

Назва продукції (англ): Scientific publication

Очікувані результати: Технології, Матеріали, Методичні документи, Наукові публікації

Галузь застосування: Матеріалознавство (матеріали для накопичення водню), воднева енергетика

Опис продукції (укр): Наукові публікації: статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science, тези доповідей в матеріалах міжнародних конференцій щодо нових гідрогенсорбційних матеріалів та електродів для металогідридних акумуляторів, де розписано процеси та механізми гідрування, кристалічна структура та фазовий склад сполук.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР, Дослідний зразок

Впровадження НТП: Є лист-підтвердження про тестування дослідницьких зразків

Строки впровадження:

Виробник продукції: Львівський національний університет імені Івана Франка

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: Отримано патент, В Україні, Права інтелектуальної власності на наукові публікації та патент на винахід

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Статті: 1. Pavlyuk N. Gas and electrochemical hydrogenation of Mg₂Sn_{0.6}Ni_{0.4} and Mg₂Sn_{0.6}Sb_{0.4} alloys / N. Pavlyuk, V. Kordan, G. Dmytriv, O. Zelinska, B. Rożdżyńska-Kiełbik, W. Ciesielski, V. Pavlyuk // Journal of Energy Storage. – 2024. – Vol. 98. – 113112 (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q1) <https://doi.org/10.1016/j.est.2024.113112>.

2. Pavlyuk N. Synthesis, crystal structure and hydrogenation properties of Mg_xLi_{3-x}B_{48-y} (x = 1.11, y = 0.40) / N. Pavlyuk, V. Milashius, V. Kordan, V. Pavlyuk // Acta Crystallographica Section E: Crystallographic Communications. – 2024. – Vol. 80, No. 1. – P. 10-13. (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q3) <https://doi.org/10.1107/S2056989023009969>.

3. Pavlyuk N. Crystal, electronic structure and hydrogenation properties of the Mg_{5.57}Ni₁₆Ge_{7.43} cluster phase with a new type of polyhedron / Nazar Pavlyuk, Grygoriy Dmytriv, Alina Bondaruk, Wojciech Ciesielski, Volodymyr Pavlyuk // Acta Crystallogr., Sect. C: Struct. Chem. – 2024. – Vol. 80, Issue 5. – C. 159-165. (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q4) <https://doi.org/10.1107/S2053229624003140>.

4. Pavlyuk N. Crystal structure and hydrogenation properties of the Mg_6CoSn ternary compound / N. Pavlyuk, G. Dmytriv, V. Pavlyuk, H. Ehrenberg // *Acta Crystallographica A*. – 2024. – Vol. 80. – С. 440. (in press).

5. Verbovytskyi Yu. Crystal structure and hydrogen sorption properties of $Nd_{0.5}Y_{0.5}MgNi_{4-x}Co_x$ alloys ($x = 0-3$) / Yu. Verbovytskyi, Kh. Vlad, I. Zavalii, B. Rozdzynska-Kielbik, V. Pavlyuk // *Solid State Sci.* – 2024. – 156. – P. 107674. (база даних Scopus, Web of Science, кваліфікація Q2) <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2024.107674>.

6. Pavlyuk N. Crystal structure of the hydrogen storage active high entropy phase $Tb_{0.82}Sm_{0.18}Ni_{0.83}Co_{0.17}Mg$ / N. Pavlyuk, V. Kordan, G. Dmytriv, V. Pavlyuk // *Z. Kristallogr. - N. Cryst. Struct.* – 2024. (on-line). (база даних Scopus, Web of Science, кваліфікація Q4) <https://doi.org/10.1515/ncrs-2024-0382>

7. Pavlyuk N. Intermetallic Materials for High-Capacity Hydrogen Storage Systems / N. Pavlyuk, V. Kordan, G. Dmytriv, M. Yarema, V. Pavlyuk // *СНІМІА* (база даних Scopus, Web of Science, кваліфікація Q3) (in press).

8. Кордан В. Синтез, фазовий склад та електрохімічне гідрування сплавів Tb_2Ni_7Mg та Tb_2Ni_7Li,Mg,Sb / В. Кордан, В. Нитка, В. Волошин, О. Зелінська, І. Тарасюк, В. Павлюк // *Вісник Львівського університету. Серія хімічна*. – 2024. – Вип. 65. – С. 122-133. – DOI: 10.30970/vch.6501.122. (категорія Б).

Тези доповідей на конференції: 1. Кордан В. М. Синтез та електрохімічне гідрування композиту $Tb_2Ni_{17-x}Mg_x/Ca_{0,5}Dy_{0,5}MnO_3$ / В. М. Кордан, В. Т. Волошин, І. І. Тарасюк, В. В. Нитка, О. І. Заремба., В. В. Павлюк // VIII Міжнародна науково-практична конференція «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення та перспективи»: Матеріали, м. Луцьк, Україна, 18-19 жовтня 2024 р. – 2024. – С. 49-51.

2. Кордан В. М. Гідрогенсорбційні властивості композити на основі $Y_2Ni_{17-x}Mg_x$ та оксидної кераміки / В. М. Кордан, Е. А. Мацько., І. І. Тарасюк, О. І. Заремба, В. В. Павлюк // VIII Міжнародна науково-практична конференція «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення та перспективи»: Матеріали, м. Луцьк, Україна, 18-19 жовтня 2024 р. – 2024. – С. 51-53.

3. Kalytovskii I. V. $LaNi_5$ doped with Zr, Mg and Sn: synthesis, phase analysis and electrochemical hydrogenation / I. V. Kalytovskii, O. Ya. Zelinska, V. M. Kordan, A. V. Zelinskiy, V. V. Pavlyuk // VIII Міжнародна науково-практична конференція «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення та перспективи»: Матеріали, м. Луцьк, Україна, 18-19 жовтня 2024 р. – 2024. – С. 34.

4. Kordan V. Electrochemical hydrogenation of the $Y_2Ni_{17}Li_xMg_x$ alloy / V. Kordan, E. Matsko, V. Nytko, I. Tarasiuk, V. Pavlyuk // VII International (XVII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists “Current Chemical Problems”: Book of abstracts, Vinnytsia, Ukraine, March 19–21 2024. – 2024. – P. 59.

5. Pavlyuk N. Crystal structure of the $Mg_{5.57}Ni_{16}Ge_{7.43}$ ternary compound / N. Pavlyuk, V. Kordan, G. Dmytriv, V. Pavlyuk // 24th International Conference on Solid Compounds of Transition Elements (SCTE2024) : Abstract book, Prague, Czech Republic, June 17–21 2024. – 2024. – p44 (147).

6. Pavlyuk N. Gas and electrochemical hydrogenation of $Mg_2Sn_{1-x}Ni_x$ and $Mg_2Sn_{1-x}Sb_x$ phases / N. Pavlyuk, V. Kordan, V. Milashius, O. Zelinska, G. Dmytriv, A. Bondaruk, V. Pavlyuk // 18th International Symposium on Metal-Hydrogen Systems: Book of abstracts, Saint- Malo, France, 26–31 May 2024. – 2024.

7. Pavlyuk N. Synthesis and crystal structure of the novel $MgNi_6Ge_6$ and $MgPd_6Ge_6$ ternary compounds / N. Pavlyuk, G. Dmytriv, W. Ciesielski, V. Pavlyuk // XXI International Conference on Inorganic Chemistry Ukraine 2024 (XXI ICICU), Uzhorod, Ukraine, 3–6 June 2024 – 2024. – P. 103.

8. Калитовський І. В. Рентгенофазовий аналіз та електрохімічне гідрування сплаву на основі $LaNi_5$, легованого Zr, Mg та Sn / І. В. Калитовський, О. Я. Зелінська, В. В. Павлюк, А. В. Зелінський, В. М. Кордан // Студентська наукова конференція хімічного факультету: Збірник тез доповідей, Львів, Україна, 16 травня 2024 р. – Львів: Малий видавничий центр хімічного та фізичного факультетів ЛНУ імені Івана Франка, 2024. – С. 14.

Патент на винахід: В. Кордан, І. Тарасюк, О. Зелінська, В. Павлюк, Р. Гладишевський, Електродний матеріал, № 128885 від 14.11.2024, Бюлетень № 46/2024. Львівський національний університет імені Івана Франка.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 125

Мова звіту: Українська

Умови поширення в Україні: Не заборонено

Умови передачі іншим країнам: Не заборонено

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Вербовицький Юрій Володимирович (к. х. н., с.н.с.)

Дмитрів Григорій Степанович (д. х. н., доц.)

Заремба Оксана Іванівна (к. х. н., доц.)

Зелінська Оксана Ярославівна (к. х. н., доц.)

Кордан Василь Михайлович (к. х. н.)

Мілашюс Вікторія Едуардівна (д.філософ)

Нитка Віталій Володимирович

Павлюк Назар Володимирович (д.філософ)

Тарасюк Іван Іванович (к. х. н.)

Керівник організації:

Мельник Володимир Петрович (д. філ. н., член-кор. НАН України)

Керівники роботи:

Павлюк Володимир Васильович (д.х.н., професор)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.