

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U001331

Державний реєстраційний номер: 0123U103492

Відкрита

Дата реєстрації: 21-01-2024



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Оптимізація процесів синтезу інтерметалідів магнію та їх термічна обробка. Фазовий склад та структурні дослідження.

Початок етапу: 08-2023

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітнього документа: Проміжний 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: 1292.165 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)

ЕЛЕКТРОДНІ МАТЕРІАЛИ, ІНТЕРМЕТАЛІЧНІ СПОЛУКИ, КОМПЛЕКСНІ ГІДРИДИ, МАГНІЄВІ СПЛАВИ, МЕТАЛОГІДРИДИ, НАКОПИЧУВАЧІ ВОДНЮ, ХІМІЧНІ ДЖЕРЕЛА СТРУМУ. Об'єкт дослідження – нові матеріали для систем накопичення, зберігання та транспортування водню, для металогідридних хімічних джерел енергії. 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. Розроблені матеріали будуть вкрай корисними в повоєнній відбудові України, зокрема в енергетичному секторі. Методи дослідження – рентгенівська порошкова і моно кристальна дифракція, мікροструктурний, локальний рентгеноспектральний аналіз, електрохімічне та газофазне гідрування, розрахунок електронної структури; програмне забезпечення для інтерпретації експериментальних результатів (пакети програм WinCSD, FULLPROF, SHELX97, TB-LMTO-ASA, ZView). 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 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 оС нижчою у порівнянні із магнієм. Питома енергоемність електродів знаходиться в межах 170-180 Вт•год/кг. Сплави є екологічно чистими, пожежо- та вибухобезпечними.

Реферат (англ)

BATTERIES, COMPLEX HYDRIDES, ELECTRODE MATERIALS, HYDROGEN STORAGE SYSTEMS, INTERMETALLIC COMPOUNDS, MAGNESIUM ALLOYS, METAL HYDRIDES. Research object: new materials for hydrogen accumulation, storage and transportation systems, and metal hydride batteries. Purpose of work: the creation of new high-tech materials for hydrogen generation, storage and transportation systems based on the proposed concept of maximum disordering of high-entropy intermetallic phases and structural modification, which will ensure high sorption capacity of hydrogen storage systems and cyclic stability of electrodes for metal hydride batteries. The developed materials will be extremely useful in the post-war reconstruction of Ukraine, particularly in the energy sector. Research methods: X-ray powder diffraction, X-ray single crystal diffraction, scanning electron microscopy, energy dispersive X-ray spectroscopy, electrochemical and gas-phase hydrogenation, electronic structure calculations; software for interpreting experimental results (WinCSD, FULLPROF, SHELX97, TB-LMTO-ASA,

ZView software packages). 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 batteries. The hydrogen sorption capacity of the developed metal hydrides reaches 1.8 wt. %, which is 10–15% higher than the capacity of analogues (LaNi₅), and the cost is lower. The hydrogen sorption capacity of the developed complex hydrides reaches 9.6 wt. %, and their desorption temperature is 50–80 °C lower compared to magnesium. The specific energy capacity of the electrodes is within 170–180 Wh/kg. Alloys are environmentally friendly, fire- and explosion-proof.

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 publications

Очікувані результати: Наукові публікації

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих наук, матеріалознавство

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

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

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Львівський національний університет імені Івана Франка

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: Права інтелектуальної власності на наукові публікації

Форми та умови передачі продукції: Відсутні умови передачі науково-технічної продукції станом на 1 етап проекту

7. Бібліографічний опис

1. Pavlyuk, N. Crystal structure of the hydrogen storage active phase La₁₂Mg₄₆LiMn / N. Pavlyuk, V. Nytko, V. Kordan, V. Pavlyuk // Z. Krist.-New Cryst. St. – 2023. – Vol. 238(6). – P. 1223–1225. (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q4). <https://doi.org/10.1515/ncrs-2023-0416>

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 Crystallogr., Sect. E: Crystallogr. Commun. – 2024. – Vol. 80. (база даних Scopus, квартиль Q3). <https://doi.org/10.1107/S2056989023009969>

3. Pavlyuk, N. Structural and hydrogenation properties of MgT₂Al (T = Co, Ni) / N. Pavlyuk, G. Dmytriv, V. Pavlyuk // Coll. Abstr. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd. (Lviv, September 25–27, 2023). – Lviv, 2023. – P. 31.

4. Milashius, V. Compositional and structural refinement of Li–B–C phases / V. Milashius, V. Kordan, V. Pavlyuk // Coll. Abstr. XV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd. (Lviv, September 25–27, 2023). – Lviv, 2023. – P. 73.

5. Мацько, Е. Синтез та електрохімічне гідрування сполуки Y₂Ni₁₇, легованої літієм та магнієм / Е. Мацько, В. Кордан, І. Тарасюк, В. Павлюк // 36. тез доп. IV Міжнар. наук. конф. «Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології». (Луцьк, 7–9 грудня 2023). – Луцьк, 2023. – С. 133–135.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 63

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 2

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

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

Дмитрів Григорій Степанович (к. 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

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.