Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U032727

Державний реєстраційний номер: 0123U103492

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-12-2024

II. Етап виконання ДіР

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 звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

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

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

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

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

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

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 22010.40

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2242.808

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

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

Назва роботи англійською:

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

Реферат українською:

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 метало-гідридних 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 англійською:

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: 31.17.15, 55.36.09.29, 81.09, 31.15.17, 31.15.33

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Павлюк Володимир Васильович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Наукові публікації

Назва НТП англійською: Scientific publication

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

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

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: 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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Є лист-підтвердження про тестування дослідницьких зразків

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Статті: 1. Pavlyuk N. Gas and electrochemical hydrogenation of Mg2Sn0.6Ni0.4 and Mg2Sn0.6Sb0.4 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 MgxLi3-xB48-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 Mg5.57Ni16Ge7.43 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 Mg6CoSn ternary compound / N. Pavlyuk, G. Dmytriv, V. Pavlyuk, H. Ehrenberg // Acta Crystallographica A. – 2024. – Vol. 80. – C. 440. (in press).

5. Verbovytskyy Yu. Crystal structure and hydrogen sorption properties of Nd0.5Y0.5MgNi4-xCox alloys (x = 0–3) / Yu. Verbovytskyy, Kh. Vlad, I. Zavaliy, B. Rozdzynska-Kielbik, V. Pavlyuk // Solid State Sci. – 2024. – 156. – P. 107674. (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q2) https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2024.107674.

6. Pavlyuk N. Crystal structure of the hydrogen storage active high entropy phase Tb0.82Sm0.18Ni0.83Co0.17Mg / N. Pavlyuk, V. Kordan, G. Dmytriv, V. Pavlyuk // Z. Kristallogr. - N. Cryst. Struct. – 2024. (on-line). (база даних Scopus, Web of Science, квартиль 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 // CHIMIA (база даних Scopus, Web of Science, квартиль Q3) (in press).

8. Кордан В. Синтез, фазовий склад та електрохімічне гідрування сплавів Tb2Ni7:Mg та Tb2Ni7:Li,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 Tb2Ni17:xMg/Ca0,5Dy0,5MnO3 / 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 Y2Ni17-xMgx 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. LaNi5 dopped 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 Y2Ni17:Lix,Mgx alloy / V. Kordan, E. Matsko, V. Nytka, 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 Mg5.57Ni16Ge7.43 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 Mg2Sn1-xNix and Mg2Sn1- xSbx 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 sructure of the novel MgNi6Ge6 and MgPd6Ge6 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 LaNi5, 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.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович
д. філ. н.

Перелік осіб-виконавців

Вербовицький Юрій Володимирович
(к. х. н., 02.00.01)

Дмитрів Григорій Степанович
(д. х. н., 02.00.01)

Заремба Оксана Іванівна
(к. х. н.)

Зелінська Оксана Ярославівна
(к. х. н., 02.00.01)

Кордан Василь Михайлович
(к. х. н., 02.00.01)

Мілашюс Вікторія Едуардівна
(д.філософ, 102)

Нитка Віталій Володимирович

Павлюк Назар Володимирович
(д.філософ, 102)

Тарасюк Іван Іванович
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Кордан Василь Михайлович

Телефон +38 (095) 380-70-41

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

