# Облікова картка ДіР

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0219U102136

**Державний реєстраційний номер:** 0119U102157

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 19-12-2019

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Фазовий та структурний аналіз гідридів

**Початок етапу:** 10.2019

**Закінчення етапу:** 12.2019

**Вид звітного документа:** Проміжний 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 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 0322616048

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Міністерство освіти і науки України

**Код за ЄДРПОУ:** 38621185

**Місцезнаходження:** просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Кабінет Міністрів України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380444814763

## 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:** 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

### Джерела фінансування

**7713 - кошти держбюджету**

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201380

| |
|---|
| **Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):** 20.9 |

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Інтерметаліди f-елементів як матриці для зберігання водню

### Назва роботи англійською:

f-Elements intermetallics as matrices for hydrogen storage

### Реферат українською:

Об'єкт дослідження – гідриди інтерметалічних сполук зі структурою типу Mo2FeB2, представників структурної серії Rm+nTm+nGan (де R – рідкісноземельний метал, T – d-метал) та сплавів твердого розчину UNiAl1-xGax. Мета дослідження – пошук сполук з оптимальними водень-сорбційними властивостями та виведення алгоритмів цілеспрямованого керування цими властивостями. Синтезовано сплави Ho2Ni2-xIn (x = 0–0,3), Ho2Ni2InxX1-x (X = Al, Ga, Sn, Sb) та Rm+nTm+nGan (R = рідкісноземельний метал, T = Co, Ni; m = 1, 2; n = 1), і окремі представники досліджено на предмет водень-сорбційних властивостей. Синтезовано гідриди сполук Ho2Ni1,7In, Ho2Ni2In0,9Al0,1 (структурний тип Mo2FeB2), Tb2Co2Ga, Tb2Ni2Ga (структурний тип W2CoB2) та Tb3Co3Ga (структурний тип W2CoB2). Методами рентгеноструктурного аналізу встановлено вплив гідрування на металічну матрицю, запропоновано моделі кристалічної структури синтезованих гідридів. На прикладі сполук зі структурою типу Mo2FeB2 показано сприятливий вплив легування алюмінієм на динаміку гідрування та важливу роль вмісту d-металу на стехіометрію гідриду. Для сполук структурної серії Rm+nTm+nGan продемонстровано роль природи d-металу на водень-сорбційні властивості. Дослідження гідридів твердого розчину UNiAl1-xGax показало, що заміщення у положенні атомів p-елементів впливають на характер модифікації кристалічної структури внаслідок гідрування, що в свою чергу має визначальний вплив на зміни фізичних властивостей. Отримані результати дозволяють спростити цілеспрямований пошук сполук з заданими водень-сорбційними властивостями.

### Реферат англійською:

The object of the studies includes hydrides of intermetallics with the Mo2FeB2 structure type, the representatives of the structure series Rm+nTm+nGan (where R is a rare-earth metal, T is a d-metal), and the alloys of the solid solution UNiAl1-xGax. The aim of the studies is the search for the compounds with optimal hydrogen-sorption properties and the derivation of the algorithms of directed modification of these properties. The intermetallic compounds Ho2Ni2-xIn (x = 0-0.3), Ho2Ni2InxX1-x (X = Al, Ga, Sn, Sb) and Rm+nTm+nGan (R = rare-earth metal, T = Co, Ni; m = 1, 2; n = 1) have been synthesized, and hydrogen-sorption properties have been studied for selected representatives. The hydrides Ho2Ni1.7In, Ho2Ni2In0.9Al0.1 (Mo2FeB2 structure type), Tb2Co2Ga, Tb2Ni2Ga (W2CoB2 structure type) and Tb3Co3Ga, the first hydride with the W3CoB3 structure type, have been synthesized. The impact of hydrogenation on the metallic matrix was studied by X-ray structure analysis, and the crystal structure models for the synthesized hydrides were suggested. The favorable impact of Al-doping on the hydrogenation dynamics and an important role of d-metal content in final hydride composition were illustrated on the example of Mo2FeB2-type compounds. For the compounds of the structure series Rm+nTm+nGan the role of the nature of d-metal affecting hydrogenation properties was shown. The studies of the solid solution UNiAl1-xGax showed that the element substitutions in the sites of p-elements influence the type of crystal structure modification upon hydrogenation, what finally predetermines the physical properties variations. The obtained results contribute to the directed search for the compounds with predetermined hydrogenation properties.

**Індекс УДК:** 539.216;539.22;538.91-405;548;620.18, 546, 546:548.3

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.04, 31.17.15

### Керівники роботи

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**Гладишевський Роман Євгенович

**Науковий ступінь:** д. х. н.

**Вчене звання:** професор

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Алгоритм модифікації водень-сорбційних властивостей інтерметалідів

**Назва НТП англійською:** Algorithm for the hydrogen-sorption propertied modifications

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Наукові публікації, Методи, теорії

**Галузь застосування:** Неорганічна хімія, фізика твердого тіла, матеріалознавство

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** На прикладі сполук Ho2Ni1,7In та Ho2Ni2In0,9Al0,1 (структурний тип Mo2FeB2) продемонстровано вплив кожного складового компонента на характер гідрування фаз: розташування атомів f-елемента визначає характер збільшення елементарної комірки, вміст Ni визначає кількість поглиненого водню, а заміщення In на Al зумовлює вищу швидкість процесу гідрування. На прикладі сполук Tb2Co2Ga та Tb2Ni2Ga (структурний тип W2CoB2) показано, що вміст Co сприяє швидшому процесу гідрування та більшому вмісту гідрогену у гідриді. Запропоновано структурні моделі для гідридів сполук Ho2Ni2In0,9Al0,1, Tb2Co2Ga та Tb3Co3Ga, у яких атоми гідрогену передусім розташовані у тетраедрах, утворених атомами f і d-елементів. Сполука Tb3Co3Ga найбільше відповідає вимогам до ефективних матриць для зберігання водню. Дослідження гідридів та дейтеридів твердого розчину UNiAl1-xGax показало, що заміщення у положенні атомів p-елементів впливають на характер модифікації кристалічної структури внаслідок гідрування, що в свою чергу має визначальний вплив на зміни фізичних властивостей. Отримані результати сприяють ефективному цілеспрямованому пошуку сполук із заданими водень-сорбційними властивостями.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Економія енергоресурсів, Економія матеріалів

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 10.2019

**Закінчення етапу:** 12.2019

**Споживачі продукції:**

**Перспективні ринки:**

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються

**Наявність бізнес-плану:** Ні

**Техніко-економічне обгрунтування:** Ні

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

Miliyanchuk K. Stabilization of a Mo2FeB2-type phase in the system Ho–Ni–In and its hydrogenation / K. Miliyanchuk, L. Havela, O. Lavriv, S. Maskova-Cerna, R. Gladyshevskii // Coll. Abs. XIV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd. – Lviv, 22 – 26 September, 2019. – P. 151.

Miliyanchuk K. Hydrogenation of structurally related phases TbmTmGa (T = Co, Ni; m = 2, 3)/ K. Miliyanchuk, N. Saidov, S. Maskova-Cerna, Ya. Tokaychuk, L. Havela, R. Gladyshevskii // Coll. Abs. XIV Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd. – Lviv, 22 – 26 September, 2019. – P. 152.

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи**

Мельник Володимир Петрович
д. філос. н., 09.00.01

**Перелік осіб-виконавців**

Лаврів Олена Ігорівна

Міліянчук Христина Юріївна
(к. х. н., 02.00.01, 102)

Саідов Назар Русланович

Токайчук Ярослав Олексійович
(02.00.01, 102)

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

Міліянчук Христина Юріївна

**Телефон**

+38 (097) 225-14-36

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності**