

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000462

Державний реєстраційний номер: 0121U108956

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розроблення матеріалів для альтернативної енергетики за використання водневих технологій та з врахуванням впливу робочих середовищ

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, буд. 5, м. Львів, Львівська обл., 79060, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322637049, 380322633088, 380322637038, 380322649427

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 9113.264

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розроблення матеріалів для альтернативної енергетики за використання водневих технологій та з врахуванням впливу робочих середовищ

Назва роботи англійською:

Development of materials for alternative energy using hydrogen technologies and taking into account the impact of working environments

Реферат українською:

Досліджено нові сплави та нанокompозитні матеріали на основі магнію з покращеними параметрами сорбції водню для використання в пристроях постачання водню для паливних комірок, а саме, $\text{MgTi}_3\text{Fe}_3\text{O}$, $\text{MgTi}_4\text{Fe}_2\text{O}_{0.3}$, MgTiFe , $\text{MgZr}_3\text{V}_3\text{O}_{0.6}$ і їх потрійні композити з графітом. Показано каталітичний вплив таких додатків на процес механохімічного гідрування магнію, зокрема, синергетичний ефект графіту та додатку, який в значній мірі пришвидшує гідрування магнію. Проведено рентгеноструктурні та мікроструктурні дослідження синтезованих композитів. Показано, що додавання малої кількості (3 мас.%) графіту дозволяє отримати більш дисперсну мікроструктуру порошків композитів. Для дослідження гідролізного генерування водню, синтезовані гідридні композити гідролізували у дистильованій воді та розчинах MgCl_2 різної концентрації (0,01...0,1 моль/л). Показано, що композити з графітом мають вищий ступінь конверсії та об'єм виділеного водню у реакціях з дистильованою водою. Додатково досліджено вплив тривалості помелу на гідролізні характеристики. Показано, що використання розчину хлориду магнію значно збільшує ступінь конверсії та об'єм виділеного водню. Також, з поступовим збільшенням концентрації MgCl_2 у розчині, приріст об'єму виділеного водню зменшується. Синтезовані гідридні композити показали наступні гідролізні характеристики: $\text{Mg-Ti}_3\text{Fe}_3\text{O-C}$ виділив 1270 мл/г водню (ступінь конверсії 85 %), $\text{Mg-Ti}_4\text{Fe}_2\text{O}_{0.3}\text{-C}$ виділив 1220 мл/г (ступінь конверсії 81 %), Mg-TiFe-C виділив 1255 мл/г (ступінь конверсії 85 %). Запропоновано модифікувати традиційну кераміку системи $(\text{ZrO}_2+\text{Y}_2\text{O}_3)\text{-NiO}$ двома способами: для підвищення йонної провідності цирконієвої фази застосувати легування оксидом CeO_2 , а частину нікелевої фази замінити на оксид CuO , оскільки мідь гальмує дисоціацію вуглеводнів. Рекомендовано температуру 700°C для прожарювання і 1400°C для спікання порошків цієї кераміки. Виявлено недоцільність перевищення вмісту нікелевої фази порівняно з цирконієвою фазою через зниження міцності та інтенсифікації

Реферат англійською:

New magnesium-based alloys and nanocomposite materials with improved hydrogen sorption parameters were investigated for use in hydrogen supply devices for fuel cells, namely, $\text{MgTi}_3\text{Fe}_3\text{O}$, $\text{MgTi}_4\text{Fe}_2\text{O}_{0.3}$, MgTiFe , $\text{MgZr}_3\text{V}_3\text{O}_{0.6}$ and their ternary composites with graphite. The catalytic effect of such additives on the process of mechanochemical hydrogenation of magnesium is shown, in particular, the synergistic effect of graphite and the additive, which significantly accelerates the hydrogenation of magnesium. X-ray structural and microstructural studies of the synthesized composites were carried out. It is shown that the addition of a small amount (3 wt.%) of graphite allows obtaining a more dispersed microstructure of composite powders. To study the hydrolytic generation of hydrogen, the synthesized hydride composites were hydrolyzed in distilled water and MgCl_2 solutions of different concentrations (0.01...0.1 mol/l). Composites with graphite were shown to have a higher degree of conversion and volume of hydrogen released in reactions with distilled water. The influence of the duration of milling on the hydrolysis characteristics was additionally investigated. It is shown that the use of magnesium chloride solution significantly increases the degree of conversion and the volume of hydrogen released. Also, with a gradual increase in the concentration of MgCl_2 in the solution, the increase in the volume of released hydrogen decreases. The synthesized hydride composites showed the following hydrolysis characteristics: $\text{Mg-Ti}_3\text{Fe}_3\text{O-C}$ released 1270 ml/g of hydrogen (85% conversion rate), $\text{Mg-Ti}_4\text{Fe}_2\text{O}_{0.3}\text{-C}$ released

1220 ml/g (81% conversion rate), Mg–TiFe–C allocated 1255 ml/g (degree of conversion 85 %). It is proposed to modify the traditional ceramics of the (ZrO₂+Y₂O₃)–NiO system in two ways: to increase the ionic conductivity of the zirconium phase, use CeO₂ oxide doping, and replace part of the nickel phase with CuO oxide, since copper inhibits the dissociation of hydrocar

Індекс УДК: 546.1, 546.11:546.112:546.46

Коди тематичних рубрик: 31.17.15.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Завалій Ігор Юліянович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Композити на основі MgH_2 з каталітичними додатками та графітом; акумулятор-компресор водню та пілотний блок генерування водню для живлення ПК; а також пластини титанового сплаву VT1-0 з покриттям на основі наноламінаційної MAX фази Ti_2AlC як полегшені інтерконекти для твердооксидної ПК.

Назва НТП англійською: New MgH_2 -based composites with catalytic additives and graphite; a hydrogen storage-compressor device and a pilot hydrogen generation unit for powering of FC; as well as plates of titanium alloy VT1-0 with a coating based on nanolaminate MAX phase Ti_2AlC as lightweight interconnects for solid oxide FC

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук (енергетика, обробна промисловість)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовані композити на основі гідриду магнію з каталітичними додатками та графітом, що володіють покращеною дисперсністю та можуть використовуватися для гідролізного генерування водню, оскільки характеризуються високим ступенем конверсії (>85%); акумулятор-компресор водню (ємність 400-500 л, тиск 200 атм) для живлення ПК (1...100 Вт), а також пілотний блок генерування водню на основі гідролізу $NaBH_4$ для живлення ПК (1...30Вт); а також тонкі (0,5 мм) пластини титанового сплаву VT1-0 з покриттям на основі наноламінаційної MAX фази Ti_2AlC , які є ефективним замінником інтерконектів з хромистої сталі типу Crofer для полегшених (~2 рази) батарей твердооксидних паливних комірок.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Розвиток вітчизняної енергетики, оборонна промисловість.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Стартапи та підприємства військово-оборонного комплексу України, КБ "Південне", Міноборони України.

Перспективні ринки: Україна, країни ближнього зарубіжжя/ЄС

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Zavaliy I., Berezovets V., Denys R., Kononiuk O., Yartys V. "Hydrogen absorption-desorption properties and hydrolysis performance of $\text{MgH}_2\text{-Zr}_3\text{V}_3\text{O}_{10}\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and $\text{MgH}_2\text{-Zr}_3\text{V}_3\text{O}_{10}\cdot 6\text{H}_2\text{O-C}$ composites" // J. Energy Storage, 65, 2023; P. 107245. (SCOPUS, Q1) <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.107245>
2. Verbovytskyi Yu., Oprysk V., Paul-Boncour V., Zavaliy I., Berezovets V., Lyutyy P., Kosarchyn Yu. Solid gas and electrochemical hydrogenation of the selected alloys $(\text{R}', \text{R}'')_{2-x}\text{Mg}_x\text{Ni}_4\text{-yCo}_y$ ($\text{R}', \text{R}'' = \text{Pr, Nd}$; $x = 0.8\text{--}1.2$; $y = 0\text{--}2$) // Journal of Alloys and Compounds 876 (2021) 160155. (SCOPUS, Q1). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160155>
3. Berezovets V. V., Kytsya A. R., Zavaliy I. Yu., Yartys V. A. Kinetics and mechanism of hydrolysis of MgH_2 in MgCl_2 solutions // International Journal of Hydrogen Energy. 46 (2021) 40278–40293 (SCOPUS, Q1). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.09.249>
4. V.V.Berezovets, R.V.Denys, I.Yu.Zavaliy, Yu.V.Kosarchyn. Effect of Ti-based nanosized additives on the hydrogen storage properties of MgH_2 // International Journal of Hydrogen Energy, Volume 47, Issue 11, 2022, Pages 7289–7298. (SCOPUS, Q1). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.019>
5. Bulyk I.I., Chabanenko V.V., Nabiałek A., Zajarniuk T., Szewczyk A., Puźniak R., Burkhovetskyi V.V., Tarenkov V.Yu., Wróbel J., Borukh I.V. Enhanced coercivity in SmCo_5 magnet subjected to hydrogen treatment // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 866. – P. 158272. (SCOPUS, Q1). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.158272>
6. Oshchapovsky I.V., Zavaliy I.Yu., Pavlyuk V.V. The investigation of hydrogen sublattice in Mg_2NiH_x ($x = 0.3$) hydride by first-principle calculations // Materials Today Communications. 27 (2021) 102174. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102174> (SCOPUS, Q2)
7. Kytsya A., Berezovets V., Verbovytskyi Y., Bazylyak L., Zavaliy I., Yartys V. Zeolite Supported Ni and Co Catalysts for Hydrogen Generation via Hydrolysis of NaBH_4 // 2021 IEEE 11th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), 2021, pp. 1-4. <https://doi.org/10.1109/NAP51885.2021.9568617>
8. Zavaliy I.Yu., Berezovets V.V., Oshchapovsky I.V., Zasadnyy T.M. Mg–TiN and Mg–ZrN Nanocomposites as Efficient Materials for the Accumulation and Generation of Hydrogen // Materials Science. 57 (2021) 53–60. <https://doi.org/10.1007/s11003-021-00514-5> (SCOPUS, Q3)
9. Y. Milewski, V. Podhurska, A. Martsinchyk, B. Vasylyv, O. Dybinski / Experimental and theoretical investigation of contact resistance in molten carbonate fuel cells // Journal of Power Sources, 2023, Volume 568, 232952 (SCOPUS, Q1)
10. Verbovytskyi Yu.V., Oprysk V.V., Shtender V.V., and Zavaliy I.Yu. Hydrogen sorption properties of materials based on alloys and components with a high content of magnesium // Materials Science, 57/3 (2021) 74–83. (SCOPUS, Q3)
11. Manilevich F.D., Pirskey Yu.K., Kutsyi A.V., Berezovets V.V., Yartys V.A. Studies of mechanochemically activated aluminum powders for generating hydrogen from water // Powder Metallurgy and Metal Ceramics, Vol. 60, Nos. 5–6, September, 2021 P.268–277. <https://doi.org/10.1007/s11106-021-00237-x> (SCOPUS, Q3)
12. V.A. Yartys, R.V. Denys, L.G. Akselrud, P. Vajeeston, R. Dankelman, J. Plomp, T. Block, R. Pöttgen, D. Wragg, B. Guilherme, F. Eggert and Vasyly Berezovets, Structure and bonding in TiNiSi type LaMgSnH intermetallic hydride, Journal of Alloys and Compounds, (2023) <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.173198> (SCOPUS, Q1)

13. V.Shtender, V.Paul-Boncour, R.Denys, D.Hedlund, P.Svedlindh, I.Zavaliy. Impact of the R and Mg on the structural, hydrogenation and magnetic properties of $R_{3-x}Mg_xCo_9$ ($R = Pr, Nd, Tb$ and Y) compounds // Materials Research Bulletin, Volume 156, December 2022, 111981. (SCOPUS, Q1)
<https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2022.111981>
14. Zavaliy, I.Y., Berezovets, V.V., Kytsya, A.R., Solonin Yu.M., Kordan V.M. MgH_2 -ZrN Composites for Hydrogen Generation by Hydrolysis // Powder Metall. Met. Ceram. – 60, 698–705 (2022). (SCOPUS, Q2)
<https://doi.org/10.1007/s11106-022-00281-1>
15. Verbovytsky Yu., Oprysk V., Lyutyy P., Zavaliy I., Electrochemical hydrogenation properties of new YNi_3 and YNi_4 based alloys // Solid State Phenomena, 2022. – Vol. 331. – P. 25–30. <https://doi.org/10.4028/p-c9wr6y> (SCOPUS, Q4)
16. VV Berezovets, AR Kytsya, TM Zasadnyy, IY Zavaliy, VA Yartys / Generation of Hydrogen by the Hydrolysis of Mixtures of Magnesium Hydride with Citric Acid // Materials Science 58 (3), 350–356 (SCOPUS, Q3)
17. T. Pikhna, M. Monastyrov, I. Soldatov, B. Büchner, L. Giebeler, A. Sathyadharma Prasad, O. Ostash, V. Moshchil, V. Podhurska, P. Potapov, V. Romaka, K. Neufeld, R. Kluge, T. Serbenyuk, M. Karpets, M. Omelyanenko, A. Wolter-Giraud, S. Ponomaryov. Corrosion-resistant polymer-based nanocomposite materials with a high level of microwave absorption and soft magnetic materials based on iron oxide nanopowder obtained by electroerosion dispersion // Ceramics International. – 2023, Volume 49, Issue 1
18. Akhkozov L., Danilenko I., Podhurska V., Shylo A., Vasylyv B., Ostash O., Lyubchyk A. Zirconia-based materials in alternative energy devices – A strategy for improving material properties by optimizing the characteristics of initial powders // International Journal of Hydrogen Energy. – 2022. – 47(97). – P. 41359–41371. (SCOPUS, Q1)
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.11.193>
19. Vasylyv B.D., Podhurska V.Ya., Ostash O.P., Danilenko I.A., Shylo A.V. Influence of redox cycling on the physicomechanical properties of ceramics of the ZrO_2 - Y_2O_3 - CeO_2 - Al_2O_3 - NiO - CuO system // Materials Science. – 2022. – 57(5). – P. 656–662. (SCOPUS, Q3) <https://doi.org/10.1007/s11003-022-00592-z>
20. Podhurska V., Kuprin O., Prikhna T., Ostash O., Pohl D., Karpets M., Sverdun V., Serbeniuk T., Chepil R., Potapov P., Ponomarov S. Development of oxidation-resistant and electrically conductive coating of Ti-Al-C system for the lightweight interconnects of solid oxide fuel cells // Heliyon 2023 accepted. (SCOPUS, Q1)

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Назарчук Зіновій Теодорович

д.ф.-м.н., 01.04.03

Перелік осіб-виконавців

Березовець Василь Васильович

(к. х. н., 02.00.01)

Вербовицький Юрій Володимирович

(к. х. н., 02.00.01)

Завалій Ігор Юліянович

(д. х. н., 02.00.01)

Осташ Орест Петрович

(д. т. н., 05.02.01)

Підгурська Вікторія Олександрівна

(к.т.н.)

Чепіль Роман Володимирович

(к.т.н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Заліско Михайло Іванович

Телефон

+38 (032) 229-65-75

Реєстратор

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

