

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U002040

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-05-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Оприск Володимир Олександрович

2. Volodymyr O. Oprysk

Кваліфікація: аспірант, м.н.с., 132

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0009-1133-0201

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 132

Назва наукової спеціальності: Матеріалознавство

Галузь / галузі знань: механічна інженерія

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Матеріалознавство

Дата захисту: 30-06-2026

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, Львів, 79060, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 02jv3ux22

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD14228

Повне найменування юридичної особи: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, Львів, 79060, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 02jv3ux22

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, Львів, 79060, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 02jv3ux22

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 81.09

Тема дисертації:

1. Синтез, структура та електрохімічні воденьсорбційні властивості сплавів AB₂ і AB₃ у системах {La, Pr, Nd, Y}–(Mg)–{Ni, Co, Mn}
2. Synthesis, structure and electrochemical hydrogenation properties of the AB₂ and AB₃ alloys in the {La, Pr, Nd, Y}–(Mg)–{Ni, Co, Mn} systems

Реферат/анотація:

1. У першому розділі здійснено системний аналіз сучасного стану наукових досліджень методів зберігання водню, зокрема фізичним і фізико-хімічним підходам, а також розглянуто принципи функціонування Ni–MH хімічних джерел струму. Узагальнено дані щодо кристалохімічних особливостей і воденьсорбційних властивостей гідридотвірних сполук та сплавів типу AB₅, AB₂ та AB₃. На підставі проведеного аналізу обґрунтовано актуальність дослідження сплавів на основі систем R–Mg–d–перехідний метал, що зумовлено їх значним потенціалом як ефективних воденьакумуючих матеріалів для потреб сучасної енергетики. У другому розділі описано методики синтезу досліджуваних зразків, зокрема електродугове плавлення, спікання порошків та метод хімічного відновлення (для нанопорошків). Охарактеризовано комплекс методів

дослідження кристалічної структури та фазового складу синтезованих матеріалів, який включає рентгенофазовий і рентгеноструктурний аналіз із уточненням структурних параметрів методом Рітвельда, сканівну електронну мікроскопію та рентгенівську фотоелектронну спектроскопію. Для оцінювання електрохімічних властивостей застосовано методи гальваностатичного циклування, визначення параметра високошвидкісного розряду (HRD), хроноамперометрії, циклічної вольтамперометрії та електрохімічної імпедансної спектроскопії, що забезпечує всебічний аналіз кінетичних і дифузійних процесів у досліджуваних електродних матеріалах. У третьому розділі наведено результати комплексного дослідження складу, кристалічної структури та електрохімічних воденьсорбційних властивостей псевдобінарних фаз Лавеса типу AB₂. Синтезовано три серії сплавів складу RMgNi₄-yCo_y (R = Pr, Pr_{0,5}La_{0,5}, Pr_{0,5}Nd_{0,5}) та встановлено межі існування відповідних твердих розчинів. Показано, що збільшення об'єму елементарної комірки внаслідок ізоморфного заміщення Pr/La та Ni/Co сприяє стабілізації η -гідридних фаз, що характеризуються підвищеною воденьсорбційною ємністю, яка досягає до 6,7 ат. Н/ф.о. для сплаву Pr_{0,5}La_{0,5}MgNi₂Co₂. Найвищу розрядну ємність серед досліджених зразків типу AB₂ продемонстрував склад Pr_{0,5}La_{0,5}MgNi_{3,5}Co_{0,5} (305 мА·год/г), тоді як максимальною циклічною стійкістю характеризується однофазний сплав PrMgNi₄ (S₃₀ = 95%). У четвертому розділі представлено результати для фаз типу AB₃. Для системи (La,Y)₃-xMgxNi₉-yCo_y встановлено оптимальний діапазон об'ємів елементарної комірки (522-535 Å³), у межах якого значення розрядної ємності стабільно перевищують 350 мА·год/г. Показано, систематичну зміну властивостей в залежності від рівня заміщення та співвідношення компонентів La/Y/Mg та Ni/Co. Таким чином, досягнуто оптимального компромісу між високою ємністю та циклічною стабільністю для сплаву La_{1,5}Y_{0,5}MgNi₇Co₂ (C_{max} = 390 мА·год/г; S₅₀ = 84%). Водночас сплав LaYMgNi₇Co₂ характеризується винятково високою циклічною стабільністю (S₅₀ = 99%), а зразок La_{1,5}Y_{0,5}MgNi₉ демонструє найкращі кінетичні характеристики, зокрема високі значення параметра високошвидкісного розряду (HRD₁₀₀₀ = 86%) та коефіцієнта дифузії водню (D_H = 2,67·10⁻¹¹ см²/с). Для серії Nd₂MgT₉ підтверджено визначальну роль співвідношення Ni у формуванні воденьсорбційних властивостей. Уперше проведено систематичне дослідження безмагнієвих фаз типу AB₃ складу RxY₃-xNi₉-yMny. Встановлено, що часткове заміщення Ni на Mn призводить до майже дворазового зростання розрядної ємності: сполуки типу RY₂Ni₈Mn демонструють значення в інтервалі 311-370 мА·год/г порівняно з 126-194 мА·год/г для вихідних фаз RY₂Ni₉. Максимальну розрядну ємність (370 мА·год/г) зафіксовано для сплаву PrY₂Ni₈Mn, що є одним із найвищих показників серед відомих безмагнієвих фаз типу AB₃ (CT PuNi₃). У п'ятому розділі досліджено вплив нанододатків на електрохімічні характеристики матеріалів негативних електродів Ni-MH хімічних джерел струму. Особливу увагу приділено нанопорошкам Ni₁₀₀-xPdx (x = 0; 1; 5; 10 ат.%), синтезованим методом хімічного відновлення. Визначено їх фазовий склад, морфологію, хімічний стан поверхні (XPS) й електрохімічні воденьсорбційні властивості. Досліджено також електрохімічну поведінку композитних електродних матеріалів на основі гідридотвірного сплаву La₂MgNi₉ з нанододатками Ni₉₅Pd₅ та Ni₇₀Fe₃₀. Показано, що нанокристалічні порошки, знижують опір перенесення заряду та забезпечують синергетичний ефект у композиційних електродних матеріалах «інтерметалічна сполука – нанододаток». Найвищу циклічну стабільність продемонстрував композит La₂MgNi₉ + Ni₉₅Pd₅ + Ni (карб.) (2:3:3) – C_{max} = 418 мА·год/г при S₃₀ = 76 %, а найвищу ємність – La₂MgNi₉ + Ni₇₀Fe₃₀ (1:1) – 492 мА·год/г при S₃₀ = 59 % (при густині струму 100 мА/г)

2. Chapter 1 provides a systematic analysis of the current state of research on hydrogen storage methods, including physical and physicochemical approaches, and reviews the operating principles of Ni-MH electrochemical power sources. Crystal-chemical features and hydrogen sorption properties of AB₅, AB₂, and AB₃ hydride-forming compounds and alloys are summarized and discussed. Based on the provided analysis, the scientific relevance of investigating alloys in R-Mg-d-transition metal system is substantiated in view of their considerable potential as efficient hydrogen storage materials for modern energy applications. Chapter 2 describes the synthesis procedures used for the preparation of samples, including arc melting, powder sintering, and chemical reduction (for nanosized powders). A comprehensive set of techniques for investigating the crystal structure and phase composition of the synthesized materials is presented, including X-ray phase analysis and X-

ray structural analysis with refinement of structural parameters using the Rietveld method, scanning electron microscopy, and X-ray photoelectron spectroscopy. Electrochemical properties were assessed by galvanostatic cycling, high-rate discharge (HRD) measurements, chronoamperometry, cyclic voltammetry, and electrochemical impedance spectroscopy, enabling a thorough analysis of kinetic and diffusion processes in the electrode materials studied. Chapter 3 presents the results of a comprehensive study of the composition, crystal structure, and electrochemical hydrogen sorption properties of AB₂ Laves phases in R-Mg-d-transition metal systems. Three series of pseudobinary Laves phase alloys with the general composition RMgNi₄-yCo_y (R = Pr, Pr_{0.5}La_{0.5}, Pr_{0.5}Nd_{0.5}) were synthesized, and the solid solution existence ranges were established. It is shown that an increase in the unit cell volume due to isomorphic substitution of Pr/La and Ni/Co contributes to the stabilization of η -hydride phases, which are characterized by higher hydrogen sorption capacity, which reaches ~6.7 at. H/f.u. for the Pr_{0.5}La_{0.5}MgNi₂Co₂ alloy. The highest discharge capacity among the investigated AB₂-type alloys was demonstrated by the Pr_{0.5}La_{0.5}MgNi_{3.5}Co_{0.5} composition (305 mAh/g), while the maximum cyclic stability was shown by the single-phase PrMgNi₄ alloy (S₃₀ = 95%). Chapter 4 presents the results for AB₃-type phases. For the (La,Y)₃-xMgxNi₉-yCo_y system, an optimal range of unit cell volumes (522-535 Å³) was established, within which the discharge capacity consistently exceeds 350 mAh/g. The La_{1.5}Y_{0.5}MgNi₇Co₂ alloy (C_{max} = 390 mAh/g; S₅₀ = 84%) was identified as offering the best compromise between high capacity and cycling stability. The LaYMgNi₇Co₂ alloy demonstrates exceptionally high cyclic stability (S₅₀ = 99%), and the La_{1.5}Y_{0.5}MgNi₉ alloy shows the best kinetic characteristics, in particular, high rate discharge (HRD₁₀₀₀ = 86%) and the hydrogen diffusion coefficient (D_H = 2.67 · 10⁻¹¹ cm²/s). For the Nd₂MgT₉ series, it is shown the decisive role of the Ni content in the formation of the hydrogen sorption properties of compounds of this type of alloys. A systematic study of Mg free AB₃-type phases with the composition R_xY₃-xNi₉-yMn_y is reported for the first time. It was found that partial replacement of Ni by Mn leads to an almost twofold increase in discharge capacity: compounds of the RY₂Ni₈Mn type demonstrate values in the range of 311-370 mAh/g compared to 126-194 mAh/g for the original RY₂Ni₉ phases. The maximum discharge capacity of 370 mAh/g was observed for the PrY₂Ni₈Mn alloy, which represents one of the highest values reported for AB₃-type phases (PuNi₃ type of structure) in Mg-free systems. Chapter 5 investigates the influence of nano-additives on the electrochemical characteristics of negative electrode materials for Ni-MH batteries. Particular attention is given to nanopowders of the Ni₁₀₀-xPdx compositions (x = 0; 1; 5; 10 at.%) synthesized via the chemical reduction method. Their phase composition, morphology, surface chemical state (XPS), and electrochemical hydrogen-sorption properties were determined. Additionally, the electrochemical behavior of composite electrode materials based on the hydride-forming La₂MgNi₉ alloy with Ni₉₅Pd₅ and Ni₇₀Fe₃₀ nano-additives was investigated. The study demonstrates that nanocrystalline powders reduce charge transfer resistance and provide a synergistic effect within "intermetallic compound – nano-additive" composite electrode materials. The highest cycling stability was demonstrated by the La₂MgNi₉ + Ni₉₅Pd₅ + Ni (carb.) (2:3:3) composite, yielding C_{max} = 418 mAh/g with S₃₀ = 76%. The highest capacity was achieved by La₂MgNi₉ + Ni₇₀Fe₃₀ (1:1), reaching 492 mAh/g at S₃₀ = 59% (at a current density of 100 mA/g).

Державний реєстраційний номер ДіР: 0125U001328, 0121U108956, 0120U104880, 0125U000767

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Verbovysky, Y., Oprysk, V., Zavaliy, I., Vlad, K., Berezovets, V. And Kosarchyn, Y., 2024. The impact of La/Y and Ni/Co substitutions on the gas-phase and electrochemical hydrogenation properties of the La₃-xMgxNi₉

alloys. Journal of Alloys and Compounds, 977, p.173247. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.173247>

- 2. Verbovytsky, Y., Oprysk, V., Dubov, Y. and Zavaliy, I., 2022. Electrochemical hydrogenation properties of Nd₂MgT₉ (T = 3d-metals) multi-phase alloys. Chemistry of Metals and Alloys, 15(1/2), pp.26-33. <https://doi.org/10.30970/cma15.0426>
- 3. Verbovytsky, Y., Oprysk, V., Lyutyy, P. and Zavaliy, I., 2022. Electrochemical Hydrogenation Properties of New YNi₃ and YNi₄ Based Alloys. Solid State Phenomena, 331, pp.25-30. <https://doi.org/10.4028/p-c9wr6y>
- 4. Verbovytsky, Y.V., Oprysk, V.O., Shtender, V.V. and Zavaliy, I.Yu., 2021. Hydrogen Sorption Properties of Materials Based on Alloys and Compounds with High Contents of Magnesium. Materials Science, 57(3). <https://doi.org/10.1007/s11003-021-00551-0>
- 5. Verbovytsky, Y., Oprysk, V., Paul-Boncour, V., Zavaliy, I., Berezovets, V., Lyutyy, P. and Kosarchyn, Y., 2021. Solid gas and electrochemical hydrogenation of the selected alloys (R', R'')₂-xMg_nNi₄-yCo_y (R', R'' = Pr, Nd; x = 0.8-1.2; y = 0-2). Journal of Alloys and Compounds, 876, p.160155. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160155>
- 6. Oprysk, V.O., Verbovytsky, Yu.V., Shtender, V.V., Lyutyy, P.Ya. and Zavaliy, I.Yu., 2018. The Pr₁-xLa_xMgNi₄-yCo_y alloys: Synthesis, structure and hydrogenation properties. Solid State Sciences, 84, pp.112-119. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2018.08.009>

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

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

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0125U001328, 0121U108956, 0120U104880, 0125U000767

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Завалій Ігор Юліанович

2. Ihor Y. Zavaliy

Кваліфікація: д.х.н., професор, академік НАН України, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9825-6922

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 55938558300; Web of Science ResearcherID DWZ-4280-2022

Повне найменування юридичної особи: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, Львів, 79060, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 02jv3ux22

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Галій Оксана Зіновіївна
2. Oksana Z. Galiy

Кваліфікація: к.х.н., с.н.с., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація: SCOPUS: 8841854300

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Омеляна Пріцака, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Золотаренко Олександр Дмитрович
2. Oleksandr D. Zolotarenko

Кваліфікація: к.х.н., с.н.с., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8933-7061

Додаткова інформація: SCOPUS: 5721119778

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Олега Мудрака, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 01298dc11

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дмитрів Григорій Степанович
2. Hryhorii S. Dmytriv

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3138-656X

Додаткова інформація: Scopus Author ID 6603159097; Web of Science Researcher ID: J-9275-2016;
<https://scholar.google.com/citations?user=Lp53G6cAAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Балицький Олександр Іванович

2. Aleksandr I. Balitskii

Кваліфікація: д.т.н., професор, 05.02.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2600-7502

Додаткова інформація: SCOPUS: 56118805900;; WoS: AAB-4031-2020

Повне найменування юридичної особи: Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження: вул. Наукова, Львів, 79060, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 02jv3ux22

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради

Корній Сергій Андрійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні

Корній Сергій Андрійович

Відповідальний за підготовку
облікових документів

Корній Валентина Василівна

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна