**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Створення та дослідження воденьсорбційних і фотокаталітичних властивостей наноструктурованих, високоентропійних та плівкових матеріалів для отримання і накопичення водню, хімічних джерел струму ”**

**Мета роботи** – розробити фізико-хімічні принципи створення та способи отримання нового покоління металогідридних та фотокаталітичних матеріалів для водневої енергетики та хімічних джерел струму.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2015 р.

закінчення IV кв. 2017 р.

**Керівник роботи:** Солонін Юрій Михайлович, чл.-кор. НАНУ,(Email: solonin@ipms.kiev.ua )

**скорочений зміст висновків рецензентів.**

Воднева енергетика, як підрозділ альтернативної енергетики, неможлива без створення нових матеріалів, зокрема для зручного і безпечного зберігання водню. В роботі, що рецензується, виконано дослідження нових функціональних матеріалів для водневої енергетики: акумуляторів водню на основі високодиспергованих гідридних фаз Mg, перехідних та рідкісноземельних елементів, отриманих механохімічним методом в середовищі водню під тиском та традиційними методами; електродних матеріалів для фотоелектрохімічної комірки, а  також дослідження процесу циклічної десорбції-сорбції водню з гідридів Mg та РЗМ як в газовому середовищі (Ar, H2), так і в електролітах  і ряду інших процесів. В рецензованій роботі з застосуванням  сучасних методів дослідження таких як рентгеноструктурний аналіз, термодесорбційна, рентгенівська фотоелектронна спектроскопія, растрова електронна мікроскопія досліджено вплив природи заміщуючого компоненту на термодинамічні, кінетичні, сорбційні характеристики, рівноважний потенціал гідридоутворення.Розроблено 2-х ступінчату модель спікання суміші порошків (LaNi3+Mg+Ni).Доведено, що з підвищенням температури спікання зростають значення максимальної розрядної ємності, циклостійкість. Робота є завершеним дослідженням. Результати досліджень отриманих в роботі нових  гідридоутворюючих і воденьсорбуючих матеріалів мають наукову і практичну цінність, будуть корисними для фахівців при прогнозуванні властивостей нових функціональних матеріалів для водневої енергетики і хімічних сполук, які синтезуються.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Результати досліджень отриманих в роботі нових гідридоутворюючих і воденьсорбуючих матеріалів мають наукову і практичну цінність, будуть корисними для фахівців при прогнозуванні властивостей нових функціональних матеріалів для водневої енергетики і хімічних сполук, які синтезуються.

Дані про реєстрацію роботи: № 0115U002249

**РЕФЕРАТ**

**Об’єкти дослідження** – легована Si, Ti, Fe, TiC гідридна фаза MgH2, що отримана методами механохімії, магнієвмісних інтерметаліди типу АВ3(La1-XMgXNi3), високоентропійних поліметалеви (Ti, Zr, V, Nb) сплави.

**Мета роботи** – розробити фізико-хімічні принципи створення та способи отримання нового покоління металогідридних та фотокаталітичних матеріалів для водневої енергетики та хімічних джерел струму.

**Методи дослідження** – рентгенівська дифрактометрія, термодесорбційна спектроскопія, растрова електронна мікроскопія, мас-спектрометрія, реактивне механічне сплавлення, високотемпературна дифрактометрія в реальному часі; потенціодинамічний метод, фото електрохімічний метод, електрохімічний метод поляризаційних кривих; адіабатична калориметрія.

Встановлено, що Ti, Fe, ТіС і Si в якості легуючих добавок до магнію в кількості до 10% ваг. дозволяють отримати такі воденьсорбційні та кінетичні характеристики гідридної фази MgH2 механічних сплавів-композитів, які забезпечують можливість їх практичного використання в стаціонарних акумуляторах водню. Проведено 2-х ступінчате спікання суміші порошків (LaNi3+Mg+Ni)  при температурах 650 0С – 1020 0С. Досліджено структуру, склад та електрохімічні характеристики спечених водень сорбуючих сплавів. Встановлено оптимальні умови спікання, для отримання сплавів з характеристиками, прийнятними для практичного застосування в якості матеріалу водень сорбуючих катодів. **Ключові слова:** ФОТОЕЛЕКТРОХІМІЧНА КОМІРКА, ЦИКЛОСТІЙКІСТЬ, КІНЕТИКА ВОДЕНЬСОРБЦІЙНІ МАТЕРІАЛИ, ВОДНЕВА ЄМНІСТЬ.

**публікації**

1. Добровольський В.Д., Єршова О.Г., Солонін Ю.М., Коваль А.Ю. Термічна стабільність та кінетика десорбції водню з гідридної фази MgH2 механічного сплаву Mg +10 % ваг. Al +10 % ваг. Ti // Відновлювана енергетика IBE. - 2015. – 3. – С. 5 -13.

2. Добровольський В.Д., Єршова О.Г., Солонін Ю.М. Термічна стійкість та кінетика десорбції водню  з гідридної фази MgH2 механічного сплаву Mg + 3 % aт. Al + 3 % aт. Ni + 7 %  aт. Ti  // J. Mater Science . – 2015. -51(4): 19-26.

3. Добровольський В.Д., Єршова О.Г., Солонін Ю.М. Дослідження впливу способу отримання та витримки на повітрі MgH2 на його термічну стійкість та кінетику десорбції з нього водню // Відновлювана енергетика ІВЕ. – 2015. – 1. - С. 14-22.

4. Єршова О.Г., Добровольський В.Д., Солонін Ю.М., Коваль А.Ю. Вплив домішок Al та Fe на термодинамічну стабільність та кінетику десорбції водню з гідридної фази MgH2 механічного сплаву // Фізика і хімія твердого тіла. - 2015. – 16 (3). - С. 77-82.

5. Добровольський В.Д., Єршова О.Г., Солонін Ю.М. Механічні сплави Mg-Me (Me: Ti, Fe, Ni, Al) та  Mg-Me1-Me2 з пониженою термічною стійкістю та покращеною кінетикою гідрування-дегідрування для їх використання в акумуляторах водню. Монографія.  «Водень в альтеративній енергетиці та новітніх технологіях» Київ – 2015, с. 136-149.

6. Dobrovolsky V.D., Ershova O.G., Solonin Yu. M. Thermal Resistance and the Kinetics of Hydrogen Desorption from Hydrides of the Mg–Al–Ni–Ti Mechanical Alloy //Materials Science. – 2016. - 51(4), 457-464, DOI10.1007/s11003-016-9862-z.

7. Dobrovolsky V.D., Ershova O.G., Solonin Yu. M., Khyzhun O.Y. Influence of titanium and iron additives to magnesium upon hydrogen-sorption properties, thermal stability and kinetics of hydrogen desorption from MgH2 phase of mechanical alloy //Powder Metallurgy & Metal Ceramics, 2016, v.55, issue  7,p.477-488.

8. Effect of nanostructural inhomogeneities on the superconducting characteristics of MgB2 with enhanced grain connectivity. / [Prikhna, T., Eisterer, M., Goldacker, W., Karpets, M.V., Basyuk, T.V., Shaternik, A.V.]. // ІEEE Transactions on Applied Superconductivity. -2015. 25 (3), 6965572.

9. M. Spodaryk, L. Shcherbakova, A. Sameljuket al. Description of the capacity degradation mechanism in LaNi5-based alloy electrodes. J. Alloys Comp. 621 (2015) 225–231.

10. Ershova O.G., Dobrovolsky V.D., SoloninY. M., Khyzhun O.Yu, Koval A.Yu. The effect of Al on thermal stability and kinetics of decomposition of MgH2 prepared by mechanochemical reaction at different conditions // Materials Chemistry and Physics. – 2015. – 162. – p.408 – 416.

11. Данько Д.Б., Силенко П.М., Шлапак А.М., Андрущенко Д.І., Хижун О.Ю, Щербакова Л.Г., Єршова О.Г., Солонін Ю.М. Фотоелектрохімічна комірка для отримання водню з гібридним фотоанодом на основі діоксиду титану. Монографія «Водень в альтеративній енергетиці та новітніх технологіях» Київ – 2015, с. 69-74.

12.Khyzhun, O.Y., Piasecki, M., Kityk, I.V., Luzhnyi, I., Fedorchuk, A.O., Fochuk, P.M., Levkovets, S.I., Karpets, M.V., Parasyuk, O.V. Tl10Hg3Cl16: Single crystal growth, electronic structure and piezoelectric properties. // Journal of Solid State Chemistry. V. 242, - 2016, - P. 193-198.

13.Karpets, M.V., Makarenko, O.S., Gorban’, V.F., Krapivka, M.O., Rokitska, O.A., Makarenko, S.Y. High-Temperature Phase Transformations in Multicomponent FeCoCrTiVAl Alloy. // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. - 2016, - № 1/2. - P. 1-8.

14. Dobrovolsky V.D. XPS study of influence of exposure to air on thermal stability and kinetics of hydrogen decomposition of MgH2 films obtained by direct hydrogenation from gaseous phase of metallic / V. D. Dobrovolsky, O. Y. Khyzhun, A. K. Sinelnichenko, O. G. Ershova, Y. M. Solonin // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. – 2017. – № 215. – Р. 28–35.

15. Dobrovolsky V.D. Alloying effect of Ti, Fe, Ni and Al on hydrogen desorption behavior of MgH2 synthesized by reactive mechanical alloying. / Valentin Davidovich Dobrovolsky, Olga Georgievna Ershova, Yuriy Michailovich Solonin // Innovations in Corrosion and Materials Science. – 2017. – V. 2, №7. – Р. 1–15.

16. Єршова О. Г. Воденьсорбційні властивості, термічна стійкість та кінетика розкладу гідридної фази MgH2 механічного сплаву магнію з Si, Ti, Fe. / О. Г. Єршова, Ю. М. Солонін, В. Д. Добровольський, А. Ю. Коваль // Відновлювана енергетика. – 2017. – № 2. – С. 26–33.

17. Єршова О. Вплив домішок Si, Fe, Ti, на температуру та кінетику дісоціації MgH2, отриманого реактивним механічним сплавленням / Єршова О., Добровольський В., Солонін Ю.,Коваль O. // Металлофизика и новейшие технологии. – 2017. – № 39. – C. 36–43.

18. Myslyvchenko O.M. Effect of annealing on the phase composition, microstructure and physical-mechanical properties&apos; evolution of high-entropy CrMnFeCoNi2Cu Alloy / Myslyvchenko O. M., Krapivka M. O., Gorban V. F., Karpets M. V., Rokitska O. A. // Metallofizika i Noveishie Tekhnologii. – 2017. – V. 39, № 5. – P. 633– 644.

19. Solonin Yu. М. Effect of Oxidation on the State of the Surface and the Electrode Capacitance of Zr–Mn–Ni–Cr–V Alloy / Yu.М. Solonin, O.Z.Galiy, K.О.Graivoronskaya, O.Y. Khyzhun // J.Materials Science. – 2017. – №53(2). – Р. 151–157.

20. Солонін Ю.М. Вплив постадійної експозиції на повітрі сплаву Zr-Mn-Cr-Ni-V на циклічну стійкість / Ю. М. Солонін, О. З. Галій, А. В. Самелюк, Л. О. Романова, К. О. Грайворонська // ФХТТ. – 2017. – Т. 18, №3. – С. 313–320.

21. Солонін Ю.М. Электрохимические свойства сплава ZrMnCrNiV при длительном циклировании после экспозиции на воздухе / Ю. М. Солонин, О. З. Галий, Е. А. Грайворонская, В. А. Лавренко // Порошкова металлургія. – 2017. – №9–10. – С. 101–109. (всього 46 праць).