Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100479

Державний реєстраційний номер: 0118U100164

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Рухливість атомів водню та їх взаємодія з дислокаціями у сплавах на основі заліза, титану та нікелю. Воднесорбційні властивості сплавів систем Ti–Zr–Mn–V–Cr і Ti–Zr–Mn. Взаємодія з воднем синтезованих MAX-фаз TiAlC, залежно від умов їх синтезу, структурно-фазового складу, тиску водню та температури. Об'ємні ефекти при спіканні багатокомпонентних порошкових систем на основі наводненого титану в умовах виділення з нього водню

Початок етапу: 02.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульв. акад. Вернадського, 36, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444243110, 380444241005

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фізичне металознавство воднестійких конструкційних матеріалів і матеріалів-накопичувачів водню

Назва роботи англійською:

Physical Metallurgy of the Hydrogen-Resistant Structural Materials and Hydrogen Storage Materials

Реферат українською:

Моделюванням впливу водню на густину електронних станів заліза показано, що введення водню супроводжується підвищенням концентрації вільних електронів. Наслідком цього є посилення металічної компоненти міжатомного зв'язку. Проведено моделювання просторового розподілу електронної густини в залізі. Зроблено висновок, що концентрація вільних електронів є підвищеною в деякому околі атомів водню і супроводжує ці атомі у вигляді атмосфери під час їх міграції. За допомогою молекулярно-динамічних розрахунків показано, що сегрегація водню на межу зерна в залізі призводить до зниження температури рекристалізації, що підтверджується експериментально. Досліджено об'ємні ефекти при нагріванні порошкових сумішей та вміст залишкових пор в сплаві системи Zr-Ti-Nb. Зазначені характеристики визначаються типом стартових порошків і, меншою мірою, загальним хімічним складом сумішей. Показано, що використання комплексних наводнених лігатур, завдяки подібній поведінці усіх частинок в системі під час нагрівання і десорбції водню, дозволяє зменшити кінцеву пористість та покращити механічні властивості сплавів даного класу. На прикладі гетерофазного евтектичного сплаву системи Ti-Zr-Mn та однофазного сплаву системи Ti-Zr-Mn-V-Cr показано, що незалежно від вихідної структури, хімічного та фазового складу, повна заміна титана йодидного на губку не впливає на структуру, фазовий склад та воднесорбційні властивості сплаву, але призводить до зниження собівартості отриманого гідриду за рахунок різної вартості вихідних матеріалів. Досліджено роль додавання MAX-фази Ti3AlC2 на сорбційні властивості гідриду магнію. Показано, що таким чином можна суттєво впливати на кінетичні та термодинамічні параметри, а також на характеристики сорбції-десорбції водню магнієм.

Реферат англійською:

Using first-principles atomic simulations of hydrogen effect on the density of electron states of iron it is shown that hydrogenation results in the increased concentration of free electrons. The consequence of such effect is the increase in the metallic component of interatomic bonding. The simulation of special distribution of electron density in iron has been carried out. It is shown that the concentration of free electrons is increased in the vicinity of hydrogen atom and form the atmosphere around it during hydrogen migration. By means of molecular dynamics simulations it is shown that hydrogen grain boundary segregation in iron decreases the recrystallization temperature that is in agreement with the experimental measurements. The volumetric effects and porosity during the heating of powder mixtures of the alloy Zr-Ti-Nb have been studied. Such characteristics depends on the types of initial powder and less by the general chemical composition of mixtures. It is shown that the usage of hydrogenated master alloys, owing to the similar behavior of all starting powder particles in the system during heating and hydrogen desorption allows to reduce the final porosity and improve the mechanical properties of studied allows. Using heterophase eutectic alloy Ti-Zr-Mn and single-phase Ti-Zr-Mn-V-Cr alloy it is shown that for any initial structure, chemical and phase composition, the substitution of titanium iodine with titanium sponge does not affects the structure, phases and hydrogen sorption properties of the alloys but results in the decreased cost price of hydride. The role of MAX-phase Ti3AlC2 addition on sorption properties of magnesium hydride has been studied. It is shown that there is an effect on the kinetic and thermodynamic parameters as well as on the hydrogen sorption and desorption properties of magnesium.

Індекс УДК: 621.039.533.6, 669.14.018.29:669.11;669.14.018.9:669.11, 669.13.017:620.18; 669.13.017:620.17, 621.762.4; 621.762.5; 621.762.82, 669.295

Коди тематичних рубрик:44.31.39, 53.49.13.05, 53.49.09, 55.23.09, 81.29.09.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Теус Сергій Миронович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Спосіб зниження собівартості систем на основі гідриду титану; метод синтезу складних карбідів титану на основі MAX-фази TiAlC; Заключний звіт

Назва НТП англійською: The cost reduction of titanium-based hydrides; method for synthesis of titanium carbides based on MAX-phase TiAlC; Final report

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: машинобудування, металургія, хімічна промисловість

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Дослідження сплавів систем Ti-Zr-Mn-V-Cr та Ti-Zr-Mn свідчить про те, що повна заміна титана йодидного на губку не впливає на структурний стан та фазовий склад сплавів. Встановлено, що додавання MAX-фази до магнію під час механоактивації в атмосфері водню суттєво впливає на кінетичні, термодинамічні та сорбційні властивості сформованого гідриду.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Зниження собівартості систем зберігання водню

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

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: 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

S.M. Teus, V.G. Gavriljuk, Molecular Dynamics Study of the Hydrogen and Carbon Effect on Mobility of Grain Boundaries in □-Iron. Metallophysics and Advanced Technologies. 41(9), 1187-1203 (2019)

S.M. Teus, V.G. Gavriljuk, Mechanical Spectroscopy Studies of Hydrogen Mobility in Titanium Doped Iron Alloy. Metallophysics and Advanced Technologies. 41(10), 1291-1301 (2019)

V.A. Dekhtyarenko, Alloy based on intermetallic (Ti,Zr)(V,Mn,Cr)2-x obtained using titanium sponge for hydrogen sorption. Metallophysics and Advanced Technologies. 41(10), 1283-1290 (2019)

V.A. Dekhtyarenko, Structure, phase composition and hydrogen sorption properties of eutectic alloy Ti47.5Zr30.2Mn22.5 obtained using titanium sponge. Materials science. Non-Equilibrium Phase Transformations. 5(3), 78-80 (2019)

Д.В. Оришич, Д.Г. Саввакін, О.О. Стасюк, Б.Я. Меламед, Твердофазний синтез сплавів системи Zr-Ti-Nb із сумішей наводнених порошків. Металофізика та новітні технології. 41(2), 213-226 (2019)

D. Oryshych, P. Markovsky, D. Savvakin, O. Stasiuk, V. Dekhtyarenko, V. Nevmerzhytskyi, Two-stage Sintering Investigation of Ti-Zr-Nb Biomedical Alloys. MTM (Machines. Technologies. Materials). Intern. Journal for science, technics and innovations. 9, 404-407 (2019)

I. Kirian, V. Voynash, A. Lakhnik, Y. Kochelab, A. Rud, Synthesis of Ti3AlC2 MAX-phases with different content of B2O3 additives. Metallophysics and Advanced Technologies. 41(10), 1273-1281 (2019)

I. Kirian, A. Lakhnik, V. Voynash, A. Rud, The effect of the MAX-phase Ti3AlC2 on hydrogen storage properties of Mg. Materials science. Non-Equilibrium Phase Transformations. 5(4), 127-129 (2019)

Заявка а 2019 01302 від. 08.02.2019, Сплав для зберігання водню, В.А. Дехтяренко, С.М. Теус, О.О. Стасюк. (Заявка на отримання Патенту на винахід, на даний час на кваліфікаційній експертизі)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Татаренко Валентин Андрійович, д. ф.-м. н., 01.04.07

Перелік осіб-виконавців

Дехтяренко Володимир Анатолійович

Кір'ян Інна Михайлівна

Оришич Денис Вікторович

Стасюк Олександр Олександрович

Відповідальний за підготовку облікових документів — Теус С.М.

Телефон — +38 (044) 424-64-27

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

