Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U005152

Державний реєстраційний номер: 0122U002456

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-12-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вимірювання фізичних властивостей сполук. Формулювання і підтвердження гіпотез.

Початок етапу: 05.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Остаточний 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, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

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: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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.): 120.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Гідрування інтерметалідів: зберігання водню та керування електронними властивостями

Назва роботи англійською:

Hydrogen storage and tuning electronic properties in metal hydrides

Реферат українською:

Метою роботи є пошук і синтез нових речовин – інтерметалічних сполук, здатних ефективно поглинати водень чи якісно змінювати внаслідок гідрування фізичні властивості, що визначаються електронною будовою фаз, для виведення закономірностей оптимізації гідроген-сорбційних властивостей інтерметалідів та модифікації магнітних властивостей інтерметалідів шляхом гідрування. В ході роботи вперше синтезовано гідриди сполук зі структурою типу (СТ) Mn2AlB2 (символ Пірсона (СП) oS10, просторова група (ПГ) Cmmm) – Ho2Ni2InH4,3 та Dy2Ni2InH4,5. Гідрування веде до виражено анізотропного збільшення об'єму елементарної комірки (ΔV/V = 14,3-14,7 %), яке в основному зумовлене зростанням параметру a (Δa/a = 13,4-13,7 %). Встановлено домінуючу роль індивідуальних структурних фрагментів типу AlB2 у процесі гідрування сполук структурної гомологічної серії на основі типів AlB2 та CsCl. Синтезовано гідрид фази YCo0,4Ni0,6 (СТ MoB, СП tI16, ПГ I41/amd), утворення якого супроводжується структурним переходом MoB □ TlI. Досліджено вплив гідрування на магнітні властивості сполук за участю атомів магнітних 3d- (YCo0,4Ni0,6, СТ MoB), 4f- (Nd2Ni2Sn, СТ W2CoB2) та 5f- (U2Fe2-xNixSn, СТ Mo2FeB2) елементів. Показано, що для сполук 3d-елементів гідрування сприяє виникненню магнітних моментів, 4f – гідрування веде до послаблення магнітних взаємодій та магнітних фрустрацій, а у випадку 5f – гідрування є тонким інструментом регулювання магнетизму в околі квантової критичної точки для сполук, що демонструють поведінку не-Фермі рідини. Результати сприяють керованій модифікації гідроген-сорбційних властивостей інтерметалідів та тонкій модифікації магнітних властивостей інтерметалідів шляхом гідрування.

Реферат англійською:

The aim of the work is the search for and synthesis of new materials, intermetallic compounds, able to absorb hydrogen efficiently or change the physical propertied qualitatively upon hydrogenation, what it determined by the electronic structure of phases, for the derivation of regularities for optimization of hydrogenation properties of intermetallilcs and modification of magnetic properties of intermetallics by hydrogenation. Within the project, the hydrides of the compounds with the Mn2AlB2 structure type (ST) (Pearson symbol (PS) oS10, space group (SG) Cmmm), Ho2Ni2InH4.3 and Dy2Ni2InH4.5, have been synthesized for the first time. Hydrogenation leads to a pronounced anisotropic expansion of the unit cell (ΔV/V = 14.3-14.7 %) which is primarily determined by the increase of the lattice parameter a (Δa/a = 13.4-13.7 %). The dominating role of individual structure fragments of AlB2 type has been determined in the hydrogenation process of the compounds belonging to the intergrowth structure series based on the AlB2 and CsCl types. The hydride of the phase YCo0.4Ni0.6 (ST MoB, PS tI16, SG I41/amd) has been synthesized, what is accompanied by the structure transition MoB □ TlI. The impact of hydrogenation on the magnetic properties of the compounds including the atoms of magnetic 3d- (YCo0.4Ni0.6, ST MoB), 4f- (Nd2Ni2Sn, ST W2CoB2), and 5f- (U2Fe2-xNixSn, ST Mo2FeB2) elements. It has been shown that hydrogenation induces magnetic moments in the compounds of 3d-elements, weakens magnetic interactions and induces magnetic frustrations for 4f-elements, and is a fine tool to tune magnetism in the vicinity of quantum critical point for 5f-compounds demonstrating non-Fermi liquid behaviour. The results contribute to the controlled modification of the hydrogenation properties of intermetallics and fine tuning of magnetic properties of intermetallics by hydrogenation.

Індекс УДК: 548, 546

Коди тематичних рубрик:31.15.17, 31.17.15

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, академік НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

Koloskova O. U2Ni2Sn-U2Fe2Sn system – where is QCP/? O. Koloskova, S. Mašková-Ćerná, A. Kolomiets, K. Miliyanchuk, A. V. Andreev, V. Buturlim, L. Havela // 51èmes Journées des Actinides : Book of Abstracts, Santa Margherita, Italy, April 10-14, 2022 – Santa Margherita, 2022. – P. 31-32.

Koloskova O. U2Ni2Sn-U2Fe2Sn system – where is QCP?/ O. Koloskova, S. Mašková-Ćerná, A. Kolomiets, K. Miliyanchuk, A. V. Andreev, V. Buturlim, L. Havela // SCTE 2022 : Abstracts Book, Bordeaux, France, June 14-17, 2022 – Bordeaux, 2022. – 58.

Саідов Н. Р. Гідриди на основі сполуки YCo / Н. Р. Саідов, Х. Ю. Міліянчук, Р. Є. Гладишевський // Студентська наукова конференція хімічного факультету – 2022 : Тези доповідей, Львів, Україна, травень, 2022 р. – С. 15

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Мельник Володимир Петрович
д. філос. н.

Перелік осіб-виконавців

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

Токайчук Ярослав Олексійович
(к. х. н., 02.00.01, 102)

Відповідальний за підготовку облікових документів Міліянчук Х.Ю.

Телефон +38 (032) 260-03-88

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

