Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106955

Державний реєстраційний номер: 0121U113810

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез інтерметалідів та гідридів: дослідження умов утворення фаз та параметрів кристалічної структури

Початок етапу: 11.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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.): 165.000

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 якісно змінювати внаслідок гідрування фізичні властивості, що визначаються електронною будовою. Особливу увагу приділено сполукам, що містять елементи, для яких характерна змінна валентність та співіснування магнітних моментах на атомах f- і d-елементів. Атоми таких елементів проявляють виняткову чутливість як до модифікацій кристалічної ґратки, так і змін у електронній структурі внаслідок утворення нових хімічних зв'язків. Встановлено обмежену розчинність Y у сполуці Ce3Si2 (СТ U3Si2) та Tb – у сполуці YCo (СТ TlI). Проведено гідрування інтерметалічних сполук в межах твердих розчинів – Ce3Si2, Ce2YSi2, YCo, Y0,9Tb0,1Co, а також сполуки з відмінною кристалічною структурою Y0,7Tb0,3Co та структурно-спорідненої до типу U3Si2 сполуки Ho2Ni2In (СТ Mn2AlB2). Для сполук YCo та Y0,9Tb0,1Co поглинання 3,2 та 3,4 ат. H/ф.о. відповідно, зумовлює виражено анізотропне розширення елементарної комірки, натомість утворення гідридів Ce3Si2H2,8, Ce2YSi2H2,1, Y0,7Tb0,3CoH3,4, Ho2Ni2InH4,3 зумовлює зміни у типі кристалічної структури, а також відчутну зміну мікроструктурних параметрів, а саме – зменшення розміру зерен. Для подальшого вивчення впливу гідрування на фізичні властивості інтерметалідів, передусім вибрано сполуки з комбінацією магнітного f-елемента та немагнітного Y. Одержані результати дозволяють регулювати гідроген-сорбційні властивості інтерметалідів через заміщення в положенні атомів f-елементів, що в свою чергу, впливає на параметри фізичних властивостей інтерметалідів та відповідних гідридів.

Реферат англійською:

The aim of the work is the search and synthesis of new materials, intermetallic compounds, which can change their physical properties qualitatively after hydrogenation, what is determined by their electronic structure. A particular attention is paid to the compounds containing elements that are characterized by a variable valence and coexistence of magnetic moments on the atoms of f- and d-elements. The atoms of such elements are extremely sensitive both to the modifications of the crystal lattice and to the changes in the electronic structure due to the formation of new chemical bonds. A limited solid solution of Y in the compound Ce3Si2 (U3Si2 ST) and Tb in the compound YCo (TlI ST) was found. Intermetallic compounds within solid solutions Ce3Si2, Ce2YSi2, YCo, Y0.9Tb0.1Co, as well as compounds with different crystal structure Y0.7Tb0.3Co and structurally related to type U3Si2 compound Ho2Ni2In (Mn2AlB2 ST) have been hydrogenated. For the compounds YCo and Y0.9Tb0.1Co, absorption of 3.2 and 3.4 at. H / f.u., respectively, results in a pronounced anisotropic unit cell expansion, while the formation of hydrides Ce3Si2H2.8, Ce2YSi2H2.1, Y0.7Tb0,3CoH3,4, Ho2Ni2InH4,3 leads to the changes in the type of crystal structure, as well as a significant change in microstructure parameters, i.e. grain size. The compounds with a combination of magnetic f-element and non-magnetic Y were selected for further studies of the effect of hydrogenation on the physical properties of intermetallics,. The obtained results allow to tune the hydrogenation properties of intermetallics via substitutions in the position of atoms of f-elements, which, in their turn, affect the parameters of the physical properties of intermetallics and the corresponding hydrides.

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

Чайка В. Особливості кристалічної структури фази Ce3-xYxSi2 за температури відпалу 600°C / В. Чайка, Х. Міліянчук, Р. Гладишевський // XVIII Наукова конференція “Львівські хімічні читання – 2021”: Зб. наук. праць, 31 травня – 2 червня 2021 р. – Львів, – с. Н31.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Лаврів Олена Ігорівна

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

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

Відповідальний за підготовку облікових документів Міліянчук Х.Ю.

Телефон +38 (099) 460-52-53

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

