

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U003036

Державний реєстраційний номер: 0114U002688

Відкрита

Дата реєстрації: 15-01-2015



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Фазові переходи водню в тонких плівках та об'ємних зразках металів

Початок етапу: 02-2014

Закінчення етапу: 12-2014

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут магнетизму НАН та МОН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 23494128

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 03142, м. Київ-142, пр.Вернадського 36-б

Телефон: 424-10-20

E-mail: vbar@imag.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442350981

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: <http://nas.gov.ua>

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 16 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Фазові переходи водню в тонких плівках та об'ємних зразках металів

Назва роботи (англ)

Hydrogen phase transitions in thin films and bulk specimens of metals

Реферат (укр)

В рамках виконання проекту було побудовано теоретичні криві розчинності водню в металі (на площині змінних тиск водню-концентрація водню в металі) для тонких плівок та об'ємних зразків металу ванадію. Для виконання цієї роботи було адаптовано теорію Ландау для опису взаємозв'язку між симетрією кристалічної ґратки металу та просторовим перерозподілом водню. Порівняння теоретичних кривих розчинності з експериментальними показує, що за допомогою теорії Ландау можна теоретично моделювати основні характеристики експериментальних кривих розчинності. Криві розчинності показують: підвищення горизонтальних платоподібних сегментів (які відповідають фазовому перетворенню водню) на кривих розчинності при збільшенні температури; звуження платоподібних сегментів при нагріванні зразку металу та зникнення фазового перетворення водню при температурі вище критичної. Однак, на відміну від об'ємних зразків металу, аксіальне механічне напруження завжди присутнє у тонких плівках та надґратках і викривлює елементарну комірку кристалічної ґратки металу. Аксіальне напруження понижує симетрію кристалічної ґратки металу і у такий спосіб сприяє фазовому перетворенню водню. Таким чином, аксіальне напруження значно змінює результати теоретичних розрахунків і забезпечує кількісне узгодження між експериментальними та теоретичними кривими розчинності. Розрахунки показують, що: 1) критична температура фазового перетворення водню зменшується експоненційно при збільшенні механічного напруження; 2) аксіальне напруження звужує інтервал застосовності закону Сіверта; та 3) аксіальне напруження збільшує емпірично визначаєму величину K , яка входить до закону Сіверта.

Реферат (англ)

In the framework of the project the theoretical solubility isotherms of hydrogen adsorption in metal (in the variable plane hydrogen pressure-hydrogen concentration) for the thin films and bulk specimens of vanadium. To this end the Landau theory was adapted for the description of interplay between crystal lattice symmetry and spatial hydrogen configuration. Comparing theoretical and experimental solubility isotherms shows that Landau theory is an adequate tool for the modeling of basic characteristics of experimental solubility isotherms. Solubility isotherms shows: the elevation of horizontal plateau-like segment (which correspond to the hydrogen phase transition) of the isotherm upon heating of the specimen; the narrowing of the plateau-like segment upon heating of the specimen and a disappearance of the hydrogen phase transition at temperatures higher than the critical temperature. However, in contrast to the bulk materials, the axial stress is omnipresent in thin films and superlattices, which distorts the unit cells of the host lattice. The axial stress reduces the symmetry of the host lattice and therefore provokes the hydrogen phase transition. According to this, the axial stress noticeably changes the computational results and provides a quantitative agreement of experimental and theoretical solubility isotherms. The calculations show that 1) the critical temperature decreases exponentially with increasing stress; 2) the axial stress narrows the interval of the applicability of Sieverts' law; and 3) the axial stress increases the empirically determined value K , which is involved in Sieverts' law.

Індекс УДК: 538.91-405;548.5.01, 538.91

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.19.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Теоретична модель для кількісного аналізу фазових переходів водню в тонких плівках та об'ємних

зразках металів.

Назва продукції (англ): Theoretical model for quantitative analysis of hydrogen phase transitions in thin films and bulk specimens of metals.

Очікувані результати:

Галузь застосування: Воднева енергетика

Опис продукції (укр): В рамках виконання проекту було побудовано теоретичні криві розчинності водню в металі (на площині змінних тиск водню-концентрація водню в металі) для тонких плівок та об'ємних зразків металу ванадію. Для виконання цієї роботи було адаптовано теорію Ландау для опису взаємозв'язку між симетрією кристалічної ґратки металу та просторовим перерозподілом водню. Порівняння теоретичних кривих розчинності з експериментальними показує, що за допомогою теорії Ландау можна теоретично моделювати основні характеристики експериментальних кривих розчинності. Криві розчинності показують: підвищення горизонтальних платоподібних сегментів (які відповідають фазовому перетворенню водню) на кривих розчинності при збільшенні температури; звуження платоподібних сегментів при нагріванні зразку металу та зникнення фазового перетворення водню при температурі вище критичної. Однак, на відміну від об'ємних зразків металу, аксіальне механічне напруження завжди присутнє у тонких плівках та надґратках і викривлює елементарну комірку k

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: п'ять років

Виробник продукції: інститут магнетизму НАН та МОН України

Споживачі продукції: НАН України

Перспективні ринки: Україна, країни ближнього та дальнього зарубіжжя

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

. Anna Kosogor, Björgvin Hjörvarsson, Victor A. L'vov, and Max Wolff, "Landau theory for phase transitions of interstitial hydrogen in strained metals" // Phys. Rev. B - 2014 - Vol. 89. - P. 014207 - 014207(6).

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 46

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Косогор А.В.

Керівник організації:

Бар'яхтар Віктор Григорович

Керівники роботи:

Косогор А.В.

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.