

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0460-10****Anorganické Fluoridové taveniny – komplexné štúdium spektrálnych, difrakčných, fyzikáлноchemických, termodynamických a štruktúrnych charakteristík.**Zodpovedný riešiteľ **Doc. Ing. Miroslav Boča, PhD.**Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Ústav anorganickej chémie SAV
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

- 1.
- 2.
- 3.

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. M. Boča, J. Moncol', Z. Netriová, D. Velič, M. Jerigová, T. S. Nunney, C. J. Baily, B. Kubíková, F. Šimko, P. Janderka: Variation of oxygen content in selected potassium fluorido-oxido-tantalate phases. *Solid State Sciences* 13, 2190-2195, (2011).
2. M. Boča, P. Barborík, M. Mičušík, M. Omastová: X-ray photoelectron spectroscopy as detection tool for coordinated or uncoordinated fluorine atoms demonstrated on fluoride systems NaF, K₂TaF₇, K₃TaF₈, K₂ZrF₆, Na₇Zr₆F₃₁ and K₃ZrF₇. *Journal of Solid State Sciences* 14, 828-832, (2012).
3. M. Korenko, M. Straka, L. Szatmáry, M. Ambrová, J. Uhlíř: Electrochemical separation of the uranium in the molten system LiF-NaF-KF-UF₄. *Journal of Nuclear Materials* 440, 332-

337, (2013).

4. F. Šimko, A. Rakhmatullin, C. Bessada, and M. Boča: MAS NMR Study of the Solidified Cryolite Systems with FeO Addition. *Journal of Fluorine Chemistry* 165, 116-122, (2014).

5. P. Barborík; Z. Vasková; M. Boča; J. Priščák. Physicochemical properties of the system LiF-NaF-KF(eut.) – Na₇Zr₆F₃₁: Phase equilibria, density and volume properties, viscosity and surface tension. *J. Chem. Thermodynamics* 76, 145–151, (2014)

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt bol podávaný v kategógii základného výskumu, napriek tomu by získané výsledky mohli nájsť uplatnenie v klasických metalurgických alebo moderných energetických aplikáciách, napr. v hlinikárenskom priemysle, resp. pri elektrochemickej separácii lantanoidov.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Predmety štúdia riešeného projektu môžeme rozdeliť do troch hlavných oblastí: 1.) Fluoridové taveniny na báze hliníka, kde sa sledoval vplyv nečistôt (Fe, Si, P) na sústavy NaF-AlF₃ a NaF-AlF₃-Al₂O₃ a vplyv korózie draselných kryolitových tavenín na keramický materiál. Zistilo sa, že SiO₂ má negatívny vplyv na elektrickú vodivosť kryolitovej taveniny. Prítomnosť AlPO₄ v týchto roztavených soliach má naopak pozitívny vplyv na hustotu a objemové vlastnosti. Po dlhodobých statických korózných testoch v rozpustených draselných kryolitových soliach, keramický materiál vizuálne nevykazoval významnú degradáciu; 2.) Fluoridové taveniny na báze nióbu a tantalu so zameraním na charakterizáciu zlúčenín a na fyzikálno-chemickú analýzu viaczložkových sústav. Fyzikálno-chemická analýza sa uskutočnila pre sústavu K₂ZrF₆-K₂TaF₇ a v systéme bola pozorovaná objemová kontrakcia; 3.) Fluoridové taveniny na báze zirkónia a štúdium koróznej odolnosti zliatin v týchto sústavách. Uskutočnila sa fyzikálno-chemická analýza sústav (FLiNaK)_{eut}-K₂ZrF₆ a (FLiNaK)_{eut} – Na₇Zr₆F₃₁. Sústavy predstavujú rezy viaczložkových sústav, a preto pri rtg. analýze zatuhnutých voriek boli identifikované viaceré zlúčeniny. Korózne testy Zr zliatin v zirkoničitých taveninách ukázali, že vplyv aditív v zliatinách a zvýšený podiel K₂ZrF₆ v tavenine má pozitívny účinok na odolnosť materiálu. XPS spektroskopia bola aplikovaná ako nová metóda na identifikáciu rôzne koordinovaných fluoridových atómov na sérii zlúčenín na báze tantalu a zirkónia - K₂TaF₇, K₃TaF₈, K₃ZrF₇ a Na₇Zr₆F₃₁, čo predstavuje prienik výsledkov z posledných dvoch oblastí.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The objects of the project can be divided into three main topics: 1.) Molten fluorides based on aluminium. The influence of impurities (Fe, Si, P) on cryolite systems (NaF-AlF₃ or NaF-AlF₃-Al₂O₃) and the influence of corrosion resistance of ceramic materials in the potassium cryolite melts have been determined. It was found out that SiO₂ has a negative impact on the electrical conductivity of cryolite melt. Contrary the presence of AlPO₄ in these molten salts has a positive impact on density and volume properties. No significant degradation of the ceramic material has been observed after the long term static corrosion tests in the molten potassium cryolite systems; 2.) Molten fluorides base on niobium and tantalum with the intention to characterise new compounds and to performe physico-chemical analysis of more component systems. Physico-chemical analysis has been performed for the system K₂TaF₇-K₂ZrF₆ and the volume contraction has been observed in the studied system; 3.) Molten fluorides based on zirconium and corrosion resistance study of alloys in molten systems. Physico-chemical analysis of the systems (FLiNaK)_{eut}-K₂ZrF₆ and (FLiNaK)_{eut} – Na₇Zr₆F₃₁ has been performed. Systems represent cross-sections of multicomponent systems and therefore several compounds have been identified after XRD analysis. Corrosion tests of Zr alloys in Zr melts have shown positive impact of additives in alloys and higher

content of K_2ZrF_6 in melts. XPS spectroscopy was applied as a new method for identification of differently bonded fluorine atoms in series of compounds based on tantalum and zirconium - K_2TaF_7 , K_3TaF_8 , K_3ZrF_7 a $Na_7Zr_6F_{31}$, which represents intersection of results of last two topics.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

doc. Ing. Miroslav Boča, PhD.

V Bratislave 28. 11. 2014

Štatutárny zástupca príjemcu

doc. Ing. Miroslav Boča, PhD.

V Bratislave 28. 11. 2014

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu