

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-15-0479**
Fluoridové taveniny kritických prvkov pre nekonvenčné aplikácie

Zodpovedný riešiteľ **doc. Ing. Miroslav Boča, DrSc.**
Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Ústav anorganickej chémie SAV

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

-

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

-

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

1. SMRČOK, Ľubomír - LE BAIL, Armel - BOČA, Miroslav - RAKHMATULLIN, Aydar. Polymorphism of K_2ZrF_6 . In Crystal Growth & Design, 2020, vol. 20, no. 6, p. 3867-3881.
2. KORENKO, Michal - ŠIMKO, František - MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila - LARSON, Carol - MIKŠÍKOVÁ, Eva - PRIŠČÁK, Jozef - AMBROVÁ, Marta - PALUMBO, Robert. Physico-chemical properties of $(MgF_2-CaF_2-(LiF))_{eut}-MgO$ system as a molten electrolyte for Mg electrowinning. In Journal of Molecular Liquids, 2019, vol. 275, p. 535-543.
3. ŠIMURDA, Michal - BOČA, Miroslav - ŠVEC, Peter - ŠVEC, Peter Jr. - JANIČKOVIČ, Dušan - SHI, Zhongning - MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila. Analysis of the extremely rapidly cooled molten system $(LiF-CaF_2)_{eut}-LaF_3$. In New Journal of Chemistry, 2018, vol. 42, p. 4612-4623.
4. ŠIMKO, František - RAKHMATULLIN, Aydar - VERON, Emmanuel - ALLIX, Mathieu - FLORIAN, Pierre - KONTRÍK, Martin - NETRIOVÁ, Zuzana - KORENKO, Michal - KAVEČANSKÝ, Viktor - BESSADA, Catherine. Oxo- and oxofluoroaluminates in the $RbF-Al_2O_3$ system: Synthesis and structural characterization. In Inorganic Chemistry, 2018, vol. 57, no. 21, p. 13702-13712.
5. MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila - BOČA, Miroslav - MIKŠÍKOVÁ, Eva - NETRIOVÁ, Zuzana. Volume properties of the molten systems $MF-K_2TaF_7$ ($MF = LiF, NaF$ and KF). In Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2017, vol. 129, no. 1, p. 475-486.

Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt bol podávaný v kategórii základného výskumu, napriek tomu by získané výsledky mohli nájsť uplatnenie v klasických metalurgických alebo moderných energetických aplikáciách, napr. v hlinikárskom priemysle alebo pri výrobe horčíka, resp. pri elektrochemickej separácii lantanoidov alebo v súvislosti so IV. Generáciou jadrových reaktorov.

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

Primárnym cieľom projektu bolo riešiť aktuálne problémy v oblasti roztavených solí v súvislosti s „kritickými“ surovinami/materiálmi cez prizmu základného výskumu s výhľadom na aplikácie v energetickom segmente v tých najširších súvislostiach. Možno konštatovať, že tento cieľ bol naplnený, čo dokumentujú publikačné výstupy projektu. Konkrétne ide o fluoridové systémy na báze skupiny prvkov Zr, Nb a Ta pričom boli analyzované štruktúrne, spektrálne, termochemické a fyzikálno-chemické vlastnosti týchto systémov prípadne konkrétnych zlúčenín. Významným výsledkom bol detailný popis štruktúrnych a spektrálnych zmien pri viacstupňovom fázovom prechode látky K₂ZrF₆. Ďalšou skupinou boli fluoridové systémy na báze fluoridu lantánu, pričom porovnávacím aspektom vybraných systémov bola systematická obmena eutektickej zmesi rozpúšťadla. Dominantnou oblasťou výskumu týchto systémov boli fyzikálno-chemické vlastnosti (fázové rovnováhy, hustota, objemové vlastnosti, povrchové napätie a elektrická vodivosť), ale aj spektrálne a difrakčné charakteristiky. Do kategórie výskumu kritických surovín patrí jednoznačne téma fluoridových tavenín na báze horčíka. V tejto oblasti boli vykonané fyzikálno-chemické analýzy systému, ktorý bol študovaný pre jeho perspektívu elektrochemického vylučovania horčíka z fluoridových tavenín. Úzko súvisiaca téma elektrochemického vylučovania kovov je výroba hliníka. V tejto oblasti boli študované systémy s potenciálom pre priemyselnú aplikáciu, konkrétne pre aplikáciu nízkoteplotných tavenín. Bola vykonaná opäť spektrálna, difrakčná a fyzikálno-chemická analýza vybraných systémov, a navyše aj analýza koróznej odolnosti keramických materiálov vo fluoridových taveninách na báze hliníka. Téma korózie bola ďalej rozvinutá aj na interakcii superzliatin a roztavených fluoridov.

Z uvedeného vyplýva, že počas riešenia projektu boli získané ucelené a hlavne komplementárne údaje o systémoch, ktoré majú potenciál pre priemyselnú aplikáciu. Takýto systematický výskum poskytuje základ pre formuláciu nových vedeckých hypotéz, ktorých prípadné potvrdenie môže mať významé ekologické, ekonomické ale aj sociálne benefity pre spoločnosť.

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

The primary goal of the project was to solve the current problems in the field of molten salts in connection with "critical" raw materials / materials through the prism of basic research with a view to applications in energy segment in the broadest context. It can be stated that this goal has been fulfilled, which is documented by the publication outputs of the project. Fluoride systems based on the group of elements Zr, Nb and Ta, were analyzed from the point of the structural, spectral, thermochemical and physicochemical properties of these systems or specific compounds. A significant result was a detailed description of the structural and spectral changes in the multistep phase transition of K₂ZrF₆. Fluoride systems based on lanthanum fluoride, with the systematic modification of the eutectic solvent mixture being a comparative aspect of the selected systems were another group of analysed systems. Physicochemical properties (phase equilibria, density, volume properties, surface tension and electrical conductivity) as well as spectral and diffraction characteristics were a dominant area of research of these systems. The topic of magnesium-based fluoride melts clearly belongs to the category of research on critical raw materials. Physico-chemical analysis of the system, which was studied for its perspective of electrochemical precipitation of magnesium from fluoride melts, was performed in this area. A closely related topic of electrochemical deposition of metals is the production of aluminum. Systems with potential for industrial applications, specifically for the application of low-temperature melts, have been studied in this area. Spectral, diffraction and physico-chemical analysis of selected systems were performed again, as well as analysis of the corrosion resistance of ceramic materials in aluminum-based fluoride melts. The topic of corrosion was further developed on

the interaction of superalloys and molten fluorides.

Comprehensive and especially complementary data on systems that have the potential for industrial application were obtained during the project solution. Such systematic research provides a basis for the formulation of new scientific hypotheses, the possible confirmation of which may have significant environmental, economic but also social benefits for society.