

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U008345

Державний реєстраційний номер: 0112U005106

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-01-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження процесів взаємодії монооксиду вуглецю, сірководню та оксиду сірки з поверхнями стабільних бінарних нанокластерів платини з використанням методів теорії функціоналу густини

Початок етапу: 05.2012

Закінчення етапу: 12.2012

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-механічний інститут ім. Г.В. Карпенка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534506

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2633088, 2649427

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

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

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 33.8

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фізико-хімічні основи формування стабільних бінарних наночастинок платини та прогнозування їх корозійної стійкості у середовищах низькотемпературних паливних комірок

Назва роботи англійською:

Physical and chemical principles of forming of stable platinum binary nanoparticles and prediction of their corrosive stability in the environments of low temperature fuel cell

Реферат українською:

На основі використання квантово-хімічних методів PM6 та теорії функціоналу густини запропоновано модель отруювання бінарних нанокластерів платини Pt42X13 (де X - перехідні метали Fe, Co, Ni) оболонкової структури активними компонентами середовища низько-температурних паливних комірок, яка базується на розрахунку адсорбційних характеристик взаємодії молекул CO, H2S та SO2 з поверхнями нанокластерів, що дозволило встановити схильність нанокластерів до утворення міцного хемосорбційного зв'язку із вказаними молекулами в залежності від типу ядра нанокластера та положень адсорбції на їх поверхнях.

Реферат англійською:

With use of quantum-chemical methods PM6 and density functional theory the model of poisoning binary platinum nanocluster Pt42X13 (where X - transitive metals Fe, Co, Ni) core shell structures by active components of environment low temperature fuel elements is proposed. The model is based on calculation of adsorption characteristics of interaction of molecules CO, H2S and SO2 with a nanocluster surface, that has allowed to establish an opportunity of nanoclusters to form strong chemisorptions bond with given molecules depending on core type of nanoclusters and site of adsorption on their surfaces.

Індекс УДК: 620.197.5; 621.357, 620.194.23:544.636.23:544.653.22

Коди тематичних рубрик: 81.33.31

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Похмурський Василь Іванович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Модель отруювання бінарних нанокластерів платини Pt42X13 (де X - перехідні метали Fe, Co, Ni) оболонкової структури молекулами CO, H₂S та SO₂ та закономірності їх адсорбції на поверхні нанокластерів

Назва НТП англійською: The model of poisoning binary platinum nanocluster Pt₄₂X₁₃ (where X - transitive metals Fe, Co, Ni) core shell structures by molecules CO, H₂S that SO₂ and regularities of their adsorption on the surface of nanoclusters

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: К 73.10.2 Дослідження і розробки в галузі технічних наук (енергетика).

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі використання квантово-хімічних методів РМ6 та теорії функціоналу густини запропоновано модель отруювання бінарних нанокластерів платини Pt₄₂X₁₃ (де X - перехідні метали Fe, Co, Ni) оболонкової структури активними компонентами середовища низько-температурних паливних комірок, яка базується на розрахунку адсорбційних характеристик взаємодії молекул CO, H₂S та SO₂ з поверхнями нанокластерів, що дозволило встановити схильність нанокластерів до утворення міцного хемосорбційного зв'язку із вказаними молекулами в залежності від типу ядра нанокластера та положень адсорбції на їх поверхнях.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Підприємства хімічної та енергетичної промисловості.

Перспективні ринки: Україна, країни СНД.

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Korniy S., Pokhmurskii V., Kopylets V. First principles simulation of bimetallic platinum nanoparticle degradation in environment of low temperature fuel cells // "Clusters and nanostructured materials" (CNN-3), 14-17.10.2012. - Uzhgorod (Ukraine). - 2012. - P. 56.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Панасюк Володимир Васильович
д. т. н., 01.02.04

Перелік осіб-виконавців

Копилець Володимир Іванович

Корній Сергій Андрійович

Косаревич Богдан Павлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

