

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U002469

Державний реєстраційний номер: 0110U003481

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-03-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Структурні фазові переходи в хемосорбованих шарах: експеримент і теорія на атомному рівні.

Початок етапу: 06.2010

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 525-12-20

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, 380442343243

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.): 246
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурні фазові переходи в хемisorбованих шарах: експеримент і теорія на атомному рівні.

Назва роботи англійською:

Structural phase transitions in chemisorbed layers: experiment and theory at the atomic level.

Реферат українською:

Метою НДР було дослідження колективної взаємодії частинок, адсорбованих на поверхні твердого тіла, і її прояву в структурних станах двовимірних систем. Методами теоретичного дослідження були метод функціонала електронної густини, комп'ютерне моделювання методом Монте Карло (МК) і методом молекулярної динаміки (МД). У тісному співробітництві з Інститутом загальної фізики РАН було проведено комплексне теоретико-експериментальне дослідження формування структур та фазових переходів в моношарах Cl на поверхні Ag(111) і отримані наступні нові результати: (1) визначено адсорбційні центри атомів Cl на поверхні Ag(111); (2) розраховано енергію взаємодії між атомами Cl на поверхні Ag(111), знайдено висоту дифузійного бар'єру і показано, що вона призводить до обмеження рухливості атомів, що є суттєвим при формуванні упорядкованих структур; (3) досліджено формування ланцюжкових структур Cl на поверхні Ag(111) методом Монте Карло (МК) і показано, що воно зумовлено непрямою взаємодією між адатомами хлору; знайдено послідовність формування структур Cl на поверхні Ag(111) і з'ясовано механізм переходу від ланцюжкової до гексагональної структури $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ при збільшенні ступеню покриття до $\theta=0.33$; (4) досліджено переходи порядок-безлад для структури $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ при покритті $\theta=0.33$ і показано, що коли плівка складається із доменів упорядкованої структури, дифракційна картинка демонструє наявність характерного розщеплення рефлексів із відповідним зменшенням інтенсивності рефлексів для структури $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$; (5) з'ясовано роль двовимірних краудіонів у рухливості доменних стінок структури $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$, розроблено комплекс комп'ютерних програм і проведено дослідження поведінки краудіонів методом молекулярної динаміки. На основі сформульованих за результатами НДР фізичних висновків щодо структур і фазових переходів в адсорбованих плівках дані рекомендації щодо можливих практичних застосувань при розробці методів сухого травлення поверхонь у мікро- і нанотехнологіях, цілеспрямованого дизайну каталізаторів, захисту металів від корозії в агресивних середовищах. Ключові слова: НАНОФІЗИКА, ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ, АДСОРБЦІЯ, ФІЗИКА ПОВЕРХНІ.

Реферат англійською:

The goal of the research was the investigation of collective interaction of particles adsorbed on a solid state surface and the role of this interaction in structural states of two-dimensional systems. The methods of theoretical investigation included the method of the electron density functional and computer modelling by the Monte-Carlo (MC) and Molecular Dynamics (MD) methods. In close collaboration with the Institute of General Physics of the Russian Academy of Sciences, a complex theoretical-experimental investigation of structures and phase transitions in Cl monolayers on the Ag(111) surface has been done, and the following new results were obtained: (1) the adsorption sites of Cl adatoms on the Ag(111) surface were found; (2) the energy of interaction between Cl adatoms on the Ag(111) surface was calculated, the activation energy of diffusion was found, and it was showed that it leads to lowering of adatom mobility which is essential at formation of ordered structures; (3) the formation of chain structures of Cl adatoms was investigated by the MC method, and it was shown that the chain structures appear due to indirect interaction between the Cl adatoms; the sequence of Cl structures on the Ag(111) surface was determined and the mechanism of the transition from the chain structure to the hexagonal $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ structure at coverage increasing to $\theta=0.33$ was established; (4) the order-disorder transition for the $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ structure at the coverage $\theta=0.33$ was investigated; it was shown that when the adlayer consists of domains of ordered structures, the diffractive patterns demonstrate the existence of specific splitting of spots with a

corresponding decreasing of the intensity of the $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ spots; (5) a role of two-dimensional crowdions in mobility of domain walls in the $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ structure was established, a set of computer programs has been developed, and the dynamics of crowdions was studied with the help of the MD method. Using the physical results of the research on structures and phase transitions in adsorbed layers, recommendations have been formulated for possible practical applications in developing dry cleaning methods in micro- and nano-technologies, designing catalysts and protecting of metals from corrosion in aggressive environment. Keywords: NANOPHYSICS, PHASE TRANSITIONS, ADSORPTION, SURFACE PHYSICS.

Індекс УДК: 538.91-405;548.5.01, 538.91-405; 548.5.01

Коди тематичних рубрик: 29.19.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Браун Олег Михайлович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Теорія структур, фазових переходів і динаміки плівок хлору, адсорбованих на поверхні срібра, що може бути використано для підвищення селективності каталітичної реакції окислення етилену.

Назва НТП англійською: The theory of structures, phase transitions and dynamics of chlorine films, adsorbed on the silver surface, that may be used to increase the catalytic reaction selectivity of ethylene oxidation.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Визначено адсорбційні центри адатомів Cl на поверхні Ag(111), розраховано енергію їх взаємодії, досліджено механізми формування ланцюжкових і гексагональної структур і переходи порядок-безлад. З'ясовано роль двовимірних краудіонів у рухливості доменних стінок, розроблено комплекс комп'ютерних програм і проведено дослідження поведінки краудіонів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2 роки.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова, Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова, Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова, КНУ ім. Т. Шевченка і НТУУ "КПІ".

Перспективні ринки: підприємства електронної і хімічної промисловості.

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

Н.В. Петрова, І.М. Яковкін, О.М. Браун, Структури адсорбованих шарів Cl на поверхні Ag (111), Укр. фіз. журн. Т. 56, №4, стр. 361-367 (2011); N.V. Petrova, I.N. Yakovkin, O.M. Braun, Lateral interaction and structures in Cl

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Яценко Леонід Петрович

Перелік осіб-виконавців

Браун Олег Михайлович

Зеленська Іріна Ільїнічна

Петрова Наталія Вікторівна

Стрижеус Дмитро Вікторович

Яковкін Іван Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

