Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U000695

Державний реєстраційний номер: 0109U005429

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-03-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення механізмів взаємодії в наносистемах бінарні нанокластери платини та паладію-кисень і встановлення взаємозв'язку розрахованих електронних характеристик нанокластерів з їх каталітичною активністю

Початок етапу: 04.2009

Закінчення етапу: 12.2009

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 31

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вивчення механізмів взаємодії в наносистемах бінарні нанокластери платини та паладію-кисень і встановлення взаємозв'язку розрахованих електронних характеристик нанокластерів з їх каталітичною активністю

Назва роботи англійською:

The study of mechamism of interactions in nanosystems: binary nanoclusters of platinum and palladium - oxygen and relationship justification between calculated electronic behaviours of the nanoclusters and their catalytic activity

Реферат українською:

Досліджено механізми поверхневих процесів в наносистемах бінарні нанокластери платини та паладію Pt37X18 і Pd37X18 (де X - перехідні метали Cr, Fe, Co, Ni) - кисень і встановлено взаємозв'язок розрахованих електронних характеристик нанокластерів з їх каталітичною активністю у реакції відновлення молекулярного кисню. Із використанням методів молекулярно-динамічного моделювання та квантово-хімічного розрахунку у наближенні теорії функціоналу густини DFT вивчено закономірності зміни електронної густини на поверхні нанокластерів під час їх взаємодії із киснем для різних стадій - хемосорбції молекулярного кисню, переносу електрону на хемосорбовану молекулу, дисоціації поверхневого молекулярного аніона кисню на атом і однозарядний іон кисню та кінцеве відновлення цього іона до двозарядного. Показано, що бінарний нанокластер Pt37Co18 володіє вищою стійкістю до окислення атомарним киснем - проміжним продуктом багатостадійного процесу електрохімічного відновлення молекулярного кисню, а отже має кращі корозійні властивості.

Реферат англійською:

Surface processes and mechanisms has been studied in nanosystems binary nanoclusters of platinum and palladium Pt37X18 , Pd37X18 (where X - transition metals Cr, Fe, Co, Ni) - oxygen and relationship has been established of calculated electronic characteristics with catalytic activity of the nanoclusters in the reaction of molecular oxygen reduction. By means of molecular dynamics simulation and quantum-chemical methods in density functional theory regularities of electron density changes at the surface of nanoclusters during their interaction with oxygen for different steps - molecular oxygen chemisorption, electron transfer to the chemisorbed molecule, dissociation of the surface molecular oxygen anion into atomic oxygen and its singly charged ion and the terminal reduction of the latter to doubly charged ion. It was shown that binary nanocluster processes higher stability to atomic oxygen reduction - as an intermediate of multi-step process of molecular oxygen electrochemical reduction, therefore it is more resistant to corrosive destruction.

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

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: Методика та практичні рекомендації щодо вибору та виробництва ефективних нанокаталізаторів відновлення кисню для катодів низькотемпературних паливних комірок

Назва НТП англійською: Technique and practical recommendations concerning a choice and manufactures effective nanocatalysts of oxygen reduction for cathodes of low temperature fuel cells

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблена методика дає змогу прогнозувати адсорбційні та каталітичні властивості в наносистемах перехідний метал-кисень, що дозволяє створити передумови та надати практичні рекомендації щодо вибору та виробництва нових ефективних нанокаталізаторів відновлення кисню для низькотемпературних паливних комірок, близьких за каталітичними властивостями до платинових металів, але які містять при цьому значно меншу кількість останніх.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2010-2012

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

V. Kopylets, V. Pokhmurskiy, S. Korniy. Simulation of organic compound oxidation on the surfaces of iron and chromium nanoclusters // In "Kin. and Thermod. for Chem.", - Nova Science Publishers. - New York . - 2009. - Vol. 2. - P. 117-124.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Панасюк Володимир Васильович
д. т. н., 01.02.04

Перелік осіб-виконавців

Копилець Володимир Іванович

Корній Сергій Андрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

