

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U009707

Державний реєстраційний номер: 0107U002167

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-12-2011

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження адсорбційних та каталітичних процесів на монокристалічній поверхні металів, оксидних плівках та нанодисперсних оксидах.

Початок етапу: 01.2007

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

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.): 3931.4

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження адсорбційних та каталітичних процесів на монокристалічній поверхні металів, оксидних плівках та нанодисперсних оксидах.

Назва роботи англійською:

Study of adsorption and catalytic processes on metal single crystal surfaces, oxide films and nanodispersed oxides.

Реферат українською:

Мета НДР: експериментальне дослідження і моделювання адсорбційно-десорбційних процесів і хімічних реакцій на поверхні металів, вивчення процесу формування і властивостей оксидних нанокompatитів, створення теорії тертя і змащування з метою розробки основ нових технологій керування структурою поверхонь, їх транспортними, каталітичними і трибологічними властивостями. Об'єкти дослідження: атомночисті, окисдовані і покриті субмоношарами монокристалічні поверхні молібдену, порожнисті і композитні нанооксиди, епітаксійні плівки вісмуту, плівки мастила. Методи дослідження: Температурно-програмована десорбція, метод молекулярного пучка, дифракція повільних електронів, оже-електронна спектроскопія, вимірювання поверхневого потенціалу, вимірювання опору, магнітоопору і холловської напруги, метод молекулярної динаміки, метод Монте-Карло, метод функціонала електронної густини. У звіті наведені результати досліджень: 1. Теорії мікроскопічних механізмів тертя. 2. Нового методу обробки експериментальних даних про розподіл концентрації дифузанта в зоні поверхневої дифузії для розрахунку концентраційної залежності коефіцієнта дифузії. 3. Адсорбції барію на тонких плівках оксиду хрому, вирощених на грані (110) молібдену. 4. Комп'ютерного моделювання електронної і атомної структури моношарів. 5. Адсорбції СО на чистій та модифікованій киснем поверхнях молібдену. 6. Технології виготовлення порожнистих наночастинок оксиду металу. 7. Термодесорбційних процесів і будови поверхневого шару нанокompatитів. 8. Механізмів поверхневого розсіювання носіїв струму на субмоношарах Tb, H, D, адсорбованих на поверхні Мо(110), розсіювання носіїв поверхневих електронних станах епітаксійних плівок Ві. Сформульовані за результатами НДР фізичні висновки важливі і можуть бути використані для розробки наукових основ таких технічних напрямків і технологій як каталітичні реакції на поверхні металів, використання нових матеріалів для змащування, керування структурою поверхні та її властивостями, створення нано- і спінтронних пристроїв.

Реферат англійською:

The aim of the project to perform experimental investigations and simulations of adsorption-desorption processes and chemical reactions on metallic surfaces, investigations of formation and properties of oxide nanocomposites, development of theory of friction and lubrication for the purpose of elaboration of new technological fundamentals for controlling structural, investigations of transport, catalytic and tribological properties of surfaces. Objects of researches are atomically-clean, ooxidized and covered by submonolayers single-crystal molybdenum surfaces, hollow and composite nanooxides, epitaxial bismuth films, films of lubricants. Research approaches are temperature-programmed desorption, molecular beam technique, low energy electron diffraction, Auger-electron spectroscopy, contact potential measurements, resistance, magnetoresistance, Hall voltage measurements, molecular dynamics, Monte-Carlo, density functional techniques. In the report the following results of investigations are considered: 1. Theory of microscopic friction mechanisms. 2. New method of treatment of experimental data on distribution of dffusant concentration in a surface diffusion region for calculation of concentration dependence of surface diffusion. 3. Adsorption of barium on thin chrome oxide films grown on the molybdenum (110) face. 4. Computer simulations of electronic and atomic structure of monolayers. 5. Adsorption of CO on clean and oxygen-modified molybdenum surfaces. 6. Fabrication technique for hollow nanoparticles of metal oxides. 7. Thermal-desorption processes and structure of surface layer of nanocomposites.

8. Mechanisms of surface scattering of current carriers on Tb, H, D submonolayers adsorbed on the Mo(110) surface and carrier scattering of Bi surface electronic states. Physical findings, formulated on basis of the Project' results, are important and can be used for development of scientific fundamentals of such technical directions and technologies as catalytic reactions on metallic surfaces, application of new lubricants, control of surface structure and properties, production of nano- and spintronic devices.

Індекс УДК: 537.533.2;537.534;538.971, 537.533.2; 537.534; 538.971

Коди тематичних рубрик: 29.35.37

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Птушинський Юрій Григорович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи адсорбційної модифікації властивостей поверхні металів і наноксидів: каталітичні реакції, тертя і змащування, керування провідністю і структурою нанооб'єктів.

Назва НТП англійською: Methods of adsorptive modification of properties of metallic surface and nanooxides: catalytic reactions, friction and lubrication, control of conductance and structure of nanoobjects.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблена нова версія методу молекулярної динаміки, що базується на рівняннях Ланжевена з коефіцієнтом загасання, залежним від координати і швидкості частинок. Розроблена феноменологічна теорія тертя, яка враховує баланс енергії в трибосистемі. Розроблено новий метод апроксимації дифузійних профілів сумою функцій похибок. Встановлено критерій наявності дисоціації СО на поверхні металу, що ґрунтується на положенні піку густини 2s станів кисню. Розроблена нова технологія одержання порожнистих наночастинок оксиду металу.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 5 років.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ІФН ім. В.Є.Лашкарьова, ІТФ ім. М.М. Боголюбова, Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова.

Перспективні ринки: підприємства електронної 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

O.M. Braun, N. Manini, and E. Tosatti, Role of lubricant molecular shape in microscopic friction, *Phys. Rev. B* 78, 195402 (2008); O.M. Braun and M. Peyrard, Modeling friction on a mesoscale: Master equation for the earthquakelike model, *Phys. Rev. Lett.* 100, 125501 (2008); O.M. Braun, I. Barel, and M. Urbakh, Dynamics of transition from static to kinetic friction, *Phys. Rev. Lett.* 103, 194301 (2009); A.T. Loburets, N.B. Senenko, M.A. Mukhtarov, Yu.S. Vedula and A.G. Naumovets, Surface diffusion in coadsorbed layers with different mobilities of adsorbates: (Li + Dy) on Mo(112) and (Li+Sr) on W(112), *Defect and Diffusion Forum*, 277, 201 (2008); A.G. Nikitin, S.V. Spichak, Yu.S. Vedula, A.G. Naumovets, Symmetries and modeling functions for diffusion processes, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42, № 5, 055301 (2009); E. V. Klimenko, L. N. Starovojtova, I. N. Zasimovich, A. G. Naumovets, Oxidation of barium on the surface of nanothick chromium oxide films grown on the (110) molybdenum substrate, *Materials Science and Engineering Technology*, 40, 273 (2009); I.N. Yakovkin and M. Gutowski, Driving force for the WO₃(001) surface relaxation, *Surf. Sci.* 601, 1481-1488, (2007); N.V. Petrova and I.N. Yakovkin, Hydrogen associative desorption from Ru(1010), *Eur. Phys. J. B* 63, 17-24, (2008); С.М. Орлик, С.О. Соловійов, Н.В. Петрова, І.М. Яковкін, Моделювання реакції окислення СО на поверхні металів платинової групи та створення ефективних каталізаторів знешкодження автомобільних викидів, *Укр. фіз. журн.* 4, 64 (2008); I.N. Yakovkin and N.V. Petrova, Absence of CO dissociation on Mo(112), *J. Chem. Phys.* 130, 174714 (2009); N.V. Petrova, V.D. Osovskii, D.Yu. Balakin, Yu.G. Ptushinskii, I.N. Yakovkin, Absence of CO dissociation on Mo: TPD and DFT study, *Surf. Rev. Lett.* Vol. 17, № 5, 1 (2010); В.С. Лисенко, О.А. Панченко, Ю.Г. Птушинський, Спосіб одержання порожнистих наночастинок оксиду металу, Патент України на винахід № 89729, 25.02.2010; V.M. Gun'ko, J.P. Blitz, K. Gude, V.I. Zarko, E.V. Goncharuk, Y.M. Nychiporuk, R. Lebeda, J. Skubiszewska-Zi?ba, V.D. Osovskii, Y.G. Ptushinskii, O.A. Mishchuk, P.P. Gorbik, Surface structure and properties of mixed fumed oxides., *J. Colloid Interface Sci.*, 314, 119 (2007); V.M. Gun'ko, V.V. Turov, V.I. Zarko, Y.M. Nychiporuk, E.V. Goncharuk, E.M. Pakhlov, G.R. Yurchenko, T.V. Kulik, T.V. Borodavka, T.V. Krupskaya, R. Lebeda, J. Skubiszewska-Zieba, V.D. Osovskii, Y.G. Ptushinskii, A.V. Turov, Structural features of polymer adsorbent LiChrolut EN and interfacial behavior of water and water/organic mixtures, *J. Colloid Interface Sci.*, 323, Issue 1, 6 (2008); V.M. Gun'ko, Ya.V. Zaulychnyy, B.I. Ilkiv, V.I. Zarko, Yu.M. Nychiporuk, Yu.G. Ptushinskii, E.M. Pakhlov, R. Lebeda, J. Skubiszewska-Zi?ba, Textural and electronic characteristics of mechanochemically activated composites with nanosilica and activated carbon, *Appl. Surf. Sci.*, 258, 1115 (2011); О.А. Панченко, С.В. Сологуб, И.В. Борденюк, Механизмы поверхностного рассеяния носителей тока на субмонослоях Tb, адсорбированных на поверхности Mo(110), *Металлофиз. новейшие технол.*, 33, 171 (2011); O.A. Panchenko, S.V. Sologub, I.V. Bordenjuk, Scattering of current carriers on a Mo(110) surface covered with hydrogen and deuterium submonolayers, *Surface Science*, 605, 1287 (2011); D. L?kermann, S. Sologub, H. Pfn?r, C. Tegenkamp, Sensing surface states of Bi by magnetotransport, *Phys. Rev. B* 83, 245425 (2011).

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Яценко Леонід Петрович

Перелік осіб-виконавців

Балакін Дмитро Юрійович

Борденюк Іван Васильович

Браун Олег Михайлович

Ведула Юрій Степанович

Гунько Володимир Мусійович

Засімович Ігор Миколайович

Лисенко Віталій Степанович

Наумовець Антон Григорович

Ничипорук Юрій Миколайович

Осовський Василь Денисович

Панченко Олег Антонович

Петрова Наталія Вікторівна

Птушинський Юрій Григорович

Сологуб Сергій Васильович

Яковкін Іван Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

