Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U008166

Державний реєстраційний номер: 0113U000754

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення механізмів взаємодії в наносистемах бінарні нанокластери платини-компоненти середовища та встановлення фізико-хімічних закономірностей корозійного розчинення нанокластерів

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

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.): 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 розраховано характеристики впливу компонентів середовища на поверхнево-активний стан бінарних нанокластерів платини оболонкової структури різного розміру, встановлені механізми адсорбційної взаємодії молекул та іонів з поверхнею нанокластерів і закономірності їх стабільності та корозійного розчинення.

Реферат англійською:

On the basis of quantum-chemical methods PM6 and density functional theory characteristics influence of components of the environment on the surface-active binary nanoclusters of platinum shell structure of different sizes is calculated and mechanisms of adsorption of molecules and ions with the surface of nanoclusters and patterns of stability and corrosion dissolution is established.

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: Методика квантово-хімічного розрахунку впливу компонентів середовища на поверхнево-активний стан бінарних нанокластерів платини оболонкової структури різного розміру, механізми адсорбційної взаємодії молекул та іонів з поверхнею нанокластерів і закономірності їх стабільності та корозійного розчинення

Назва НТП англійською: Methods of quantum-chemical calculation of the influence components of the environment on the surface-active binary nanoclusters of platinum shell structure of different sizes, the adsorption mechanisms of interaction of molecules and ions from the surface of the nanoclusters and patterns of stability and corrosion dissolution

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук (енергетика).

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі використання квантово-хімічних методів PM6 та теорії функціоналу густини запропоновано методику розрахунку характеристик впливу компонентів середовища на поверхнево-активний стан бінарних нанокластерів платини оболонкової структури різного розміру, встановлені механізми адсорбційної взаємодії молекул та іонів з поверхнею нанокластерів і закономірності їх стабільності та корозійного розчинення

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

S.Korniy, V.Pokhmurskii, V.Kopylets, B.Kosarevych. Theoretical study of poisoning of a platinum binary nanocluster in oxygen chemisorption at cathodes of PEM fuel cells // Proc. Int. conf. "Nanotechnology and nanomaterials", - Bukovel (Ukraine). - 2013. - P. 226.

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