

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U000737

Державний реєстраційний номер: 0115U000765

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження структурних, електронних, енергетичних та каталітичних властивостей графену, алмазу, алмазних та металевих наноструктурованих плівок.

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Запорізький національний університет

Код за ЄДРПОУ: 02125243

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (061) 764 45 46

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Комунальний заклад «Запорізький обласний центр охорони культурної спадщини» Запорізької обласної ради

Код за ЄДРПОУ: 20525130

Місцезнаходження: вул. Троїцька, 31, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69063, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 7645610

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2291040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 114.454
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фізико-хімічні властивості графену, поверхні та приповерхневих шарів алмазу, алмазних та металевих наноструктурованих плівок.

Назва роботи англійською:

Physicochemical properties of graphene, diamond surface and subsurface layers, diamond and metal nanostructured films.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: фізико-хімічні процеси на поверхні та у приповерхневих шарах алмазу та у графені; методи отримання та дослідження властивостей наноострівцевих і наноструктурованих металевих плівок. Мета: експериментальне та теоретичне дослідження фізико-хімічних властивостей поверхні та приповерхневих шарів алмазу, графену, графану, алмазних і металевих наноструктурованих плівок для встановлення взаємозв'язку їхніх структурних, електронних та адсорбційних характеристик. Методи дослідження та перелік апаратури: для моделювання поверхні алмазу та графенів використовували квантово-хімічні методи; для отримання та дослідження металевих острівцевих плівок – експериментальні (термічне напылення у вакуумі, електронна мікроскопія та оже-спектроскопія, мас-спектрометрія). Наведені результати квантово-хімічного моделювання впорядкованих поверхонь алмазу (100)-2Ч1, (111)-2Ч1 та поверхонь, що містять вакансійні та комплексні дефекти; графенів різної форми, розміру та типу кромки; графенів із лінійними дефектами. Описані геометричні й електронні характеристики фторографенів і оксидів графенів, встановлені особливості механізмів початкових стадій росту алмазних плівок на алмазних і кремнієвих підкладках. Представлені результати експериментальних досліджень з отримання та дослідження електрофізичних і каталітичних властивостей лабораторних зразків наноострівцевих і наноструктурованих металевих плівок. Результати апробовано у виробництві на ТОВ "Елемент-Перетворювач" і на ТОВ "ТД Запоріжсклофлюс" та впроваджено в навчальну й наукову діяльність Запорізького національного та Запорізького національного технічного університетів. Область застосування: мікро- та наноелектроніка, альтернативна енергетика, приладобудування, хімічна промисловість, гетерогенний каталіз.

Реферат англійською:

The object of study – physical and chemical processes on the surface and in the subsurface layers of diamond and in graphene; methods of formation and study of the properties of nano-island and nanostructured metal films. The goal of the work: experimental and theoretical study of the physical and chemical properties of the surface and subsurface layers of diamond, graphene, graphane, diamond and metal nanostructured films in order to establish the relationship between their structural, electronic and adsorption characteristics. Research methods and equipment list: quantum-chemical methods for modeling the surface of diamond and graphene were used; for formation and study of metal island films – experimental methods were used (thermal deposition in vacuum, electron microscopy and Auger-electron spectroscopy, mass spectrometry). The results of quantum-chemical modelling of ordered diamond (100)-2Ч1, (111)-2Ч1 surfaces and surfaces containing vacancy and complex defects and also of graphenes of various shapes, size and type of edge and graphenes with linear defects are presented. Geometric and electronic characteristics of fluorographenes and graphene oxides are described, features of the mechanisms of the initial stages of diamond films growth on diamond and silicon substrates are established. The experimental results of formation and study of the electrophysical and catalytic properties of laboratory samples of nano-island and nanostructured metal films are presented. Results are introduced in production process at "Zaporizhskloflux Trade House" LTD and LLC "Element-Converter", and in the educational and scientific activities of the Zaporizhzhya National and Zaporizhzhya National Technical Universities. Possible application: micro- and

nanoelectronics, alternative energy, instrumentation, chemical industry, heterogeneous catalysis.

Індекс УДК: 532.61, 532.612:539.216:549.21:544.023.22

Коди тематичних рубрик: 31.15.35.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Яновський Олександр Сергійович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Квантово-хімічні моделі взаємодії частинок адсорбатів із поверхнею вуглецевих матеріалів
Методика формування металевих наноструктур різного розміру та топології.

Назва НТП англійською: Quantum chemical models of adsorbates interaction with carbon materials surface. Formation procedure of metal nanostructures with different size and topology.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Мікро- та наноелектроніка, матеріалознавство, гетерогенний каталіз, приладобудування.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Наведені результати квантово-хімічного моделювання впорядкованих поверхонь алмазу (100)-2Ч1 (111)-2Ч1 та поверхонь, що містять вакансійні та комплексні дефекти; графенів різної форми, розміру й типу кромки; графенів із лінійними дефектами. Описані геометричні й електронні характеристики фторографенів і оксидів графенів, встановлені особливості механізмів початкових стадій росту алмазних плівок на алмазних і кремнієвих підкладках. Представлені результати експериментальних досліджень з отримання та дослідження електрофізичних і каталітичних властивостей лабораторних зразків наноострівцевих і наноструктурованих металевих плівок.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: МОНУ

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 4000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Ananina O. Yu. Theoretical Study of Graphene Functionalization by F⁻ and FHF⁻ Ions from Associates with Water Molecules / O. Yu. Ananina, N. A. Lvova. - Computational Material Science, 2015. - Vol. 101. - P. 287-292. (Scopus, impact factor 1,97). 2. Ananina O. Hydrogen adsorption on the diamond c(111) surface: quantum-chemical simulation / O. Ananina and E. Severina. - Вісник Київського національного університету. Серія: Радіофізика та електроніка, 2014. - Вип. № 1/2 (21/22). - С. 8-10. (видано в 2015 р.) 3. Гранкин В. П. Необратимое хемозлектронное преобразование энергии в гетероструктурах для водородной энергетики / В. П. Гранкин, Д. В. Гранкин - Письма в ЖТФ, 2015. - Т. 41, вып. 24. - С. 29-36. (Scopus, impact factor 0.583). 4. Ананьина О. Ю. Моделирование вакансионного дефекта на поверхности C(111) / О. Ю. Ананьина, Е. В. Северина - Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2016. - № 5. - С. 81-87. 5. Ananina O. Simulation of a vacancy defect at the C(111)-2 x 1 surface / O. Ananina and E. Severina. - Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2016. - Vol. 10, № 3. - P. 542-547 (Scopus, impact factor 0,359). 6. Lvova N. A. The divacancy V2 and V-C=C-V configurations on the diamond surface: quantum-chemical simulation / N. A. Lvova, O. Yu. Ananina and E. V. Severina. - Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2016. - Vol. 7, № 1. - P. 87-92. 7. Ананьина О. Ю. P-V центры в приповерхневых шарах алмазу C(111) / О. Ю. Ананьина, О. В. Северина. - Фізика і хімія твердого тіла, 2016. - Т. 17, № 1. - С. 48-52. 8. Lvova N. A. Theoretical study of the adsorption properties of porous boron nitride nanosheets / N. A. Lvova, O. Yu. Ananina. - Computational Material Science, 2016. - Vol. 115. - P. 11-17. (Scopus, impact factor 1,97). 9. Lvova N. A. Fluorine and carbon fluoride interaction with a diamond surface: quantum-chemical modeling / N. A. Lvova, O. Yu. Ananina. - Computational Material Science, 2016. - Vol. 124. - P. 30-36. (Scopus, impact factor 1,97). 10. Grankin V. P. Detection of UV Light Based on Chemically Stimulated Luminescence of Crystal Phosphors / V. P. Grankin, D. V. Grankin, M. A. Martysh. - Optics and Spectroscopy, 2016. - Vol. 120, № 6. - P. 909-914 (Scopus, impact factor 0,64). 11. Nonequilibrium electronic phenomena and the chemical energy accommodation during heterogeneous recombination of atomic hydrogen on the manganese doped willemite / V. P. Grankin, D. V. Grankin, V. V. Styrov, M. Sushchikh. - Chemical Physics Letters, 2016. - Vol. 647. - P. 145-149 (Scopus, impact factor 1,84). 12. Features of the Electrical Conductivity of Fe, Ni, Ti, and Pt Nanoisland Films: Hysteresis and Ion-Field Processes / S. V. Tomilin, V. N. Berzhansky, A. S. Yanovsky, O. A. Tomilina. - Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2016. - Vol. 10, № 4. - P. 868-877 (Scopus, impact factor 0,359). 13. Особенности электропроводности наноостровковых пленок Fe, Ni, Ti, Pt. Гистерезис и ионно-полевые процессы / С. В. Томилин, В. Н. Бержанский, А. С. Яновский, О. А. Томилина. - Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2016. - № 8 - С. 96-106. 14. Получение наноостровковых пленок Sn, Al, Cu и исследование их электропроводящих свойств / С. В. Томилин, В. Н. Бержанский, Е. Т. Милукова [и др.]. - Физика твердого тела, 2017. - Т. 59, вып. 4 - С. 639-647. 15. Synthesis and Conductive Properties of Nanoisland Sn, Al, and Cu Films / S. V. Tomilin, V. N. Berzhansky, E. T. Milyukova [et al.]. - Physics of the Solid State, 2017. - Vol. 59, № 4. - P. 652-660 (Scopus, impact factor 0,831). 16. Modeling of fluorine atoms interaction with the fluorinated diamond C(100)-(2x1) surface / N. A. Lvova, O. Yu. Ananina, A. I. Ryazanova, A. O. Yemeljanova. - Diamond & Related Materials, 2017. - Vol. 75 - P. 110-115. (Scopus, impact factor 2,125). 17. Примесь бора на поверхности алмаза: квантово-химическое моделирование / Н. А. Львова, О. В. Пономарев, О. Ю. Ананьина, А. И. Рязанова. - Журнал Физической Химии, 2017. - Т. 91, № 8. - С. 1320-1325. 18. Boron Atoms in the Subsurface Layers of Diamond: Quantum Chemical Modeling / N. A. Lvova, O. V. Ponomarev, O. Yu. Ananina, A. I. Ryazanova. - Russian Journal of Physical Chemistry A, 2017. - Vol. 90, № 8. - P. 1451-1456. (Scopus, impact factor 0,58). 19. Пат. № 108243. Україна, МПК C23C 14/04, C23C 14/00. Спосіб отримання наночастинок на носіях / Томілін С. В., Яновський О. С.; заявник та патентовласник Запорізький національний університет. - № а 2013 00460; заявл. 14.01.2013, опубл. 10.04.2015, Бюл. № 7.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Фролов Микола Олександрович

Перелік осіб-виконавців

Ананьїна Ольга Юріївна

Северина Любов Миколаївна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

