

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0223U003832

**Державний реєстраційний номер:** 0120U101197

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 07-07-2023

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Розробка методик визначення складу та математичне моделювання процесів при аналізі нових неорганічних матеріалів, у тому числі функціональних матеріалів медичного призначення, хімічним, емісійним спектральним, мас-спектрометричним та атомно-абсорбційним методами

**Початок етапу:** 01.2020

**Закінчення етапу:** 12.2022

**Вид звітнього документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416930

**Місцезнаходження:** вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, 03142, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380443908751, 380443908757, 380442057901, 380444241524, 380444242271, 380444242131

## 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, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 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):** 654 1030

|                                                           |
|-----------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 4932.436 |
|-----------------------------------------------------------|

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Розробка методик визначення складу та математичне моделювання процесів при аналізі нових неорганічних матеріалів, у тому числі функціональних матеріалів медичного призначення, хімічним, емісійним спектральним, мас-спектрометричним та атомно-абсорбційним методами

### Назва роботи англійською:

Development of methods for determining the composition and mathematical modeling of processes in the analysis of new inorganic materials, including functional materials for medical purposes by chemical, emission spectral, mass spectrometric and atomic absorption methods

### Реферат українською:

Об'єкт дослідження – хімічні і фізико-хімічні процеси при застосуванні хімічних, фізико-хімічних та атомно-спектрометричних методів аналізу елементного складу неорганічних матеріалів. Мета роботи – створення методик мас-спектрометричного, емісійного спектрального (ЕС), аналізу нових матеріалів, для яких відсутні стандартні зразки, аналізу наночастин карбону в їх суміші. Експериментально одержано, термо-кінетичні характеристики реакцій розкладу матеріалів карбону нано на основі цибулин, графітових пакетів, поперечно-, конусно-волокнистих та згорнутих у сувій волокон, багато- та одношарових трубок при температурах 623K - 1273K. Запропонована модель розмірної залежності частинок нано від концентрації оксисену (2-) пов'язаного з периферійними атомами карбону (бору) з обірваними хімічними зв'язками. Розроблена процедура атестації готової продукції матеріалів карбону нано. Методом математичного моделювання та експериментально проаналізовані мас-спектри гідроксиапатиту в жевріючому розряді. Створений атлас молекулярних інтерференцій при аналізі цього матеріалу. Розроблена математична модель і комп'ютерна програма, розраховані параметри іскрового розряду в повітрі та інтенсивності спектральних ліній атомів та іонів титану та бориду титану. Розроблена концепція ЕС аналізу нових тугоплавких матеріалів на основі бориду титану з використанням стандартних зразків титанових сплавів. Сплави потрійної системи Cu-In-Yb становлять інтерес з точки зору технологічного застосування, головним чином як нові магнітні матеріали. Методом ізопериметричної калориметрії визначено парціальні та інтегральні ентальпії змішування розплавів в інтервалі складів  $0 < x_{Yb} < 0,7$  системи Cu-Yb і 5 променевих перерізів системи Cu-In-Yb до  $x_3 < 0,3$  за температур 1453 - 1473K. Запропоновані методики створюють теоретичний фундамент атомно-спектрометричних та фізико-хімічних методів елементного аналізу неорганічних матеріалів.

### Реферат англійською:

The object of research is chemical and physico-chemical processes when applying chemical, physico-chemical and atomic spectrometric methods of analyzing the elemental composition of inorganic materials. The purpose of the work is to create mass spectrometric, emission spectral techniques, analysis of new materials for which there are no standard samples, analysis of nanoforms of carbon in their mixture. The thermo-kinetic characteristics of the decomposition reactions of carbon nano materials based on bulbs, graphite packets, cross-, cone-fibrous and coiled fibers, multi- and single-layer tubes at temperatures of 623K - 1273K were experimentally obtained. The proposed model of the size dependence of nano particles on concentration oxycene (2-) connected to peripheral carbon atoms (boron) with broken chemical bonds. A procedure for attestation of finished products of carbon nano materials has been developed. Using mathematical modeling and experimentally analyzed mass spectra of hydroxyapatite in a spark discharge. An atlas of molecular interferences was created during the analysis of this material. A mathematical model and a computer program were developed, the parameters of the spark discharge in air and the intensity of the spectral lines of atoms and ions of titanium and titanium boride were calculated. The concept of analysis of new refractory materials based on titanium boride using standard samples of titanium alloys was developed. Alloys of the Cu-In-Yb ternary system are of interest from the point of view of technological

application, mainly as new magnetic materials. The method of isoperibolic calorimetry determined the partial and integral enthalpies of mixing of melts in the range of compositions  $0 < x_{Yb} < 0.7$  of the Cu–Yb system and 5 radial cross sections of the Cu–In–Yb system up to  $x_3 < 0.3$  at temperatures of 1453–1473K.

**Індекс УДК:** 543.62

**Коди тематичних рубрик:** 31.19.15

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Курочкін Володимир Данилович

**Науковий ступінь:** д. х. н.

**Вчене звання:** пров.н.с.

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Методики визначення складу та математичне моделювання процесів при аналізі нових неорганічних матеріалів хімічним, емісійним спектральним, мас-спектрометричним методами аналізу

**Назва НТП англійською:** Composition determination methods and mathematical modeling of processes in the analysis of new inorganic materials by chemical, emission spectral, and mass spectrometric methods of analysis

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** М 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Експериментально одержано, термо-кінетичні характеристики реакцій розкладу матеріалів карбону нано на основі цибулин, графітових пакетів, поперечно-, конусно-волокнистих та згорнутих у сувій волокон, багато- та одношарових трубок при температурах 623K - 1273K. Запропонована модель розмірної залежності частинок нано від концентрації оксисену (2-) пов'язаного з периферійними атомами карбону (бору) з обірваними хімічними зв'язками. Розроблена процедура атестації готової продукції матеріалів карбону нано. Методом математичного моделювання та експериментально проаналізовані мас-спектри гідроксиапатиту в жевріючому розряді. Створений атлас молекулярних інтерференцій при аналізі цього матеріалу. Розроблена математична модель і комп'ютерна програма, розраховані параметри іскрового розряду в повітрі та інтенсивності спектральних ліній атомів та іонів титану та бори́ду титану. Розроблена концепція ЕС аналізу нових тугоплавких матеріалів на основі бори́ду титану з використанням стандартних зразків титанових сплавів. Сплави потрійної системи Cu-In-Yb становлять інтерес з точки зору технологічного застосування, головним чином як нові магнітні матеріали. Методом ізопериметричної калориметрії визначено парціальні та інтегральні ентальпії змішування розплавів в інтервалі складів  $0 < x_{Yb} < 0,7$  системи Cu-Yb і 5 променевих перерізів системи Cu-In-Yb до  $x_3 < 0,3$  за температур 1453 - 1473K. Запропоновані методики створюють теоретичний фундамент атомно-спектрометричних та фізико-хімічних методів елементного аналізу неорганічних матеріалів.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:**

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:**

**Перспективні ринки:**

**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**

1. Курочкін В.Д. Математичне моделювання взаємного впливу елементів методом фундаментальних параметрів при рентгенофлуоресцентному аналізі високоентропійного сплаву типу AlCrFeCoNiCu / В.Д. Курочкін, О.М. Романенко, В.В. Пух // Порошкова металургія. – 2020. – №1/2. – С. 150.
2. Курочкін В.Д. Параметри іскрової плазми між електродами з TiB<sub>2</sub> та титану. чисельне моделювання та експеримент / В.Д.Курочкін, О.М.Романенко, М.В. Коломицев // Порошкова металургія. – 2021. – №5/6. – С. 129-141.
3. Kurochkin V.D. Investigation of molecular interferences at GDMS analysis of main elements and microalloying of high-entropy alloy AlCrFeCoNiCu / V.D. Kurochkin, O.M. Romanenko, M.V. Kolomytsev // Methods and objects of chemical analysis. – 2022. – Vol. 17(1). – P. 43-53.
4. Курочкін В.Д. Спектроскопічна діагностика електричної ерозії електродів з високоентропійного сплаву CrMnFeCoNi в іскровому розряді в повітрі. Моделювання, експеримент / В.Д. Курочкін, О.М. Романенко, М.В. Коломицев // Порошкова металургія. – 2022. – 5/6.– С. 3-16.
5. Термодинамічні властивості та фазові рівноваги в сплавах системи Ba–Sn / В.С. Судацова, Л.О. Романова, М.І. Іванов та ін. // Порошкова металургія. – 2020. – № 7/8. – С. 122-138.
6. Термодинамические свойства расплавов систем Gd–Sn и Gd–Sn–Ni / В.С. Судацова, М. А. Шевченко, В. Г. Кудин и др. // Журнал физической химии. – 2021. – № 2(95). – С. 237-243.
7. Thermodynamic Properties of Gd–Sn and Gd–Sn–Ni Melt Systems / V.S. Sudavtsova, M. A. Shevchenko, V. G. Kudin and others // Journal of Physical Chemistry(Russian).– 2021. – № 2(95). – P. 170–176.
8. Термодинамічні властивості та фазові рівноваги у сплавах системи Gd–Sn / В.С. Судацова, М. О. Шевченко, В. Г. Кудін та ін. // Порошкова металургія. – 2021. – №3/4.– С.121-135.
9. Фазовые равновесия и термодинамика сплавов системы Ni–Pr / В. Г. Кудин, Л. А. Романова, М. А. Шевченко, В. С. Судацова // Журнал физической химии. – 2021. – № 7(95). – С. 975-981.
10. Термодинамические свойства и фазовые равновесия в сплавах In–Sr / В.С. Судацова, М. А. Шевченко, В. Г. Кудин и др. // Журнал физической химии. – 2021. – №10(95). – С. 1464-1473.
11. Термодинамічні властивості розплавів системи In–Tb / А.С. Дудник, В. Г. Кудин, Л. О. Романова, В. С. Судацова // Успіхи матеріалознавства.–2021.–№3.– С.79–89
12. Термодинамічні властивості розплавів системи Bi – Eu / В. С. Судацова, В.А. Шевчук, Л. О. Романова, М. І. Іванов // Успіхи матеріалознавства.–2021.–№3.– С. 90–99.
13. Термодинамічні властивості сплавів подвійних In–Pr(Nd) і потрійних систем In–Pr(Nd)–Ni / А.С. Дудник, В. Г. Кудин, Л. О. Романова, В. С. Судацова // Успіхи матеріалознавства.–2021.–№3.– С. 102-108.
14. Термодинамічні властивості сплавів та фазові рівноваги у системі Cu–Yb / А.С. Дудник, В. С. Судацова, Л. О. Романова та ін. // Порошкова металургія.–2022.–№5/6.– С. 102-108.

15. Thermokinetic model for the formation and oxidation of carbon nanoforms / V. Garbuz, L. Kuzmenko, V. Petrova, T. Silinskay // Powder Metallurgy. – 2020. – № 03/04. – P. 30-41.
16. Термічна кінетика окиснення порошків графену-мікро в потоці кисню / В. В. Гарбуз, В. А. Петрова, Т. А. Сілінська, та ін. // Порошкова металурія. – 2021. – № 05/06. – С.42-50.
17. Specific surface, crystalite size of AlB12-nano of products of interaction "BN-Al" in vacuum / V. A. Petrova, V. V. Garbuz, V. B. Muratov, M. V. Karpets and others // збірник «Поверхня» - Київ. – 2021. – №13(28) –P. 175–181.
18. Specific surface, crystallite size and thermo-kinetic of oxide formation of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanopowders at 570 -1470K / V.V. Garbuz, V.A. Petrova, T.A. Silinskaya, T.F. Lobunets, O.I. Bykov, V.B. Muratov, T.M. Terentyeva, L.M. Kuzmenko, O.O. Vasiliev, O.I. Olifan, T. Homko // збірник «Поверхня» - Київ. – 2020. – №12(27) –P. 146–152.
19. Thermokinetic model for the formation and oxidation of carbon nanoforms / V. Garbuz L. Kuzmenko, V. Petrova, T. Silinskay // Powder metallurgy. – № 03/04. – 2020. – P. 30-41.
20. Термічна кінетика окиснення порошків графену-мікро в потоці кисню / В. В. Гарбуз, В. А. Петрова, Т. А. Сілінська, та ін. // Порошкова металурія. – № 05/06. – 2021. – С. 42-50.
21. Silicon in Intericosahedra Chains of Boron Carbide / O. Vasiliev, V. Muratov, P. Mazur and others // Journal of the European Ceramic Society. – 2022. – Vol.42(13). – P. 5515-5521.

## **Х. Заключні відомості**

### **Керівник юридичної особи**

Солонін Юрій Михайлович  
д. ф.-м. н., 01.04.07

### **Перелік осіб-виконавців**

Гарбуз Віктор Васильович

(к. х. н.)

Каушан Валентина Володимирівна

Кузьменко Людмила Миколаївна

Петрова Вера Альбертівна

Романенко Ольга Митрофанівна

Романова Лариса Олександрівна

(к. х. н.)

Сілінська Тетяна Андріївна

Терентьева Тетяна Михайлівна

### **Відповідальний за підготовку**

Романова Л.О.

### **облікових документів**

### **Телефон**

+38 (050) 879-69-89

### **Реєстратор**

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

