**Звіт про науково-дослідну роботу: “Розробка атомно-спектрометричних та хімічних методик аналізу елементного та фазового складу неорганічних нанопорошків, та нанокомпозитних матеріалів, математичне моделювання фізико-хімічних процесів при аналізі і синтезі наноматеріалів”**

**Мета роботи** – розробка атомно-спектрометричних та фізико-хімічних методів аналізу матеріалів на базі вивчення основних фізико-хімічних процесів, які виникають при дії на матеріали високих температур, взаємодії с плазмою розрядів, а також взаємодії з киснем, вуглецем та іншими компонентами.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2011р.
 закінчення IV кв. 2013 р.

**Керівник роботи**: Дубок В.А. д.х.н.,( Email:dubok@ipms.kiev.ua)

Дані про реєстрацію роботи: N 011U002404

 **Скорочений зміст висновків рецензентів .**

Висновки внутрішньої і зовнішньої рецензії позитивні, без зауважень. Розроблені авторами підходи та математичні моделі можуть бути використані у подальших дослідженнях нових матеріалів. Одержані результати відповідають світовому рівню.

 **Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Пропонується продовжити роботи у даному напрямку з метою дослідження хімічних властивостей та розробки методик аналізу нових матеріалів.

 **РЕФЕРАТ**

**Мета роботи** – розробка атомно-спектрометричних та фізико-хімічних методів аналізу матеріалів на базі вивчення основних фізико-хімічних процесів, які виникають при дії на матеріали високих температур, взаємодії с плазмою розрядів, а також взаємодії з киснем, вуглецем та іншими компонентами. Уточнена формула для розрахунку абсолютних швидкостей реакцій. Показано, що послідовне дотримання принципів квантової механіки призводить до визначення частотного коефіцієнта з співвідношення невизначеності Гейзенберга для енергії. На прикладі розрахунку швидкості випаровування ряду тугоплавких металів і показані можливості знайденої формули. Розроблено математичну модель процесу утворення конденсатів при електронно-променевому випаровуванні та конденсації бінарних металевих систем. Модель включає розрахунки кінетики росту і структури кінетичним методом Монте-Карло та розрахунки процесів масо-переносу. На прикладі системи Сu-Сr показано, що при певних умовах в системі виникають автоколивальний, аперіодичний або стохастичний режими конденсації, що призводить до появи шаруватих структур із складною ієрархією товщ шарів від нанометричних до макроскопічних. Проведено комплексний хімічний аналіз та вивчені фізико-хімічні властивості нанорозмірних частинок турбостратного ВN, розроблені методики визначення В, N, О у нанорозмірних порошках ВN, Н та С в нанопорошках ВN графітоподібної, вюрцитної та сфалеритної структури. Створено метод розрахунку площі нанорозмірних частинок турбостратного ВN графітоподібної структури. Досліджені окислені вуглецевих наноформи у В4С. Розширена та уточнена комп'ютерна база даних по ефективних константах рівноваги реакцій утворення іонних кластерів в плазмі жевріючого розряду, створено атлас молекулярних інтерференцій при аналізі бінарної системи Сu-Мо. Розроблена і експериментально перевірена математична модель процесів у плазмі іскрового розряду в повітрі. Розраховано параметри плазми та їх вплив на інтенсивності їх спектральних ліній при аналізі алюмінієвих сплавів. Результати НДР упроваджені в процес розробки нових матеріалів.

 **КЛЮЧОВІ СПОВА: ФАЗОВИЙ СКЛАД, СИНТЕЗ НАНОМАТЕРІАЛІВ**.

 **Публікації**

Курочкін В.Д. Частотний коефіцієнт в теорії абсолютних швидкостей реакцій //

Доповіді Національної академії наук України, 2012.- №10-С.130-135.

Гарбуз В.В., Муратов В.Б., Васильев А.А., Дуда Т.И./ Влияние газообразующих примесей на теплоемкость нанокристаллического алмаза детонационного синтеза.// Наноструктурное материаловедение, 2011. - №1. - С. 23 - 32.

Рогальова Н.С., Шкотова Л.В., Львова О.В., Муратов В.Б., Васільєв О.О., Корпан Я.Л., Білоіван О.А., Гарбуз В.В./ Амперометричний біосенсор, модифікований багатошаровими вуглецевими нанотрубками, для визначення глюкози // Біотехнологія. 2012. Т.1. №1. С.53-61.

Muratov V.B., Vasil'ev 0.0.,Garbuz V.V., Kulikov L.M., Nesterenko I.V., Duda T.I. / Thermodynamic properties of multiwalled carbon nanotubes // J. Super hard Mat. 2012. Y31.N3.P.I73-178

Гарбуз В.В., Херовимчук Л.С, Петрова В.А., Яковлев О. М., Щербицька О.В. / Особливості класифікації наноматеріалів // Наноструктурное материаловедение. 2012. №3. С.78-83.

Петрова В.А., Яковлев А.В., КузьменкоЛ.Н., Херовимчук Л.С., Аврамчук С.К., Шатских С.К. / Метод импульсной восстановительной экстракции. Разложение углеродом микро- и нанопорошков слоистых и плотных фаз нитрида бора. // Наноструктурное материаловедение. 2012. №4. С.34 - 39.

Гарбуз В.В., Херовимчук Л.С., Петрова В.А., Яковлев О. М., Щербицька О.В. / Особливості класифікації наноматеріалів // Наноструктурное материаловедение. 2012. №3. С.78-83.

Петрова В.А., Яковлев А.В., КузьменкоЛ.Н., Херовимчук Л.С., Аврамчук С.К., Шатских С.К. / Метод импульсной восстановительной экстракции. Разложение углеродом микро- и нанопорошков слоистых и плотных фаз нитрида бора. // Наноструктурное материаловедение. 2012. №4. С.34 - 39.

 Курочкін В.Д. Математичне моделювання процесу утворення шаруватих
конденсатов при електронно-променевому випаровуванні-конденсації бінарних
систем типу Cu-Cr // Доповіді Національної академії наук України, 2014-№3.-С90~ 97;