**Звіт про науково-дослідну роботу:„Теоретичні і експериментальні дослідження фізико-хімічних процесів, які лежать в основі фазово-хімічних та атомно-спектрометричних методів аналізу, з метою розробки методик аналізу нових типів сплавів, композитів та наноматеріалів”**

**Мета роботи** - створення методик емісійного спектрального та мас- спектрометричного аналізу сапфіру високої чистоти; аналіз кінетики реакцій в рамках теорії перехідного стану; розробка методики визначення складу порошків та фаз у системі А1-В-С; розробка методики синтезу і рафеноподібного нітриду бору, а також методики селективного визначення вуглецевих наноформ в їх суміші.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2014 р.

 закінчення IV кв. 2016 р.

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

**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.

 Дані про реєстрацію роботи: № 011U002404

 **РЕФЕРАТ**

 **Об’єкт дослідження** — хімічні і фізико-хімічні процеси при застосуванні хімічних, фізико-хімічних та атомно-спектрометричних методів аналізу елементного складу неорганічних матеріалів (мас-спектрометричного з жевріючим розрядом, емісійного спектрального із іскровим збудженням спектрів), а також кінетика швидкого розтікання краплі розплаву.

**Мета роботи** - створення методик емісійного спектрального та мас- спектрометричного аналізу сапфіру високої чистоти; аналіз кінетики реакцій в рамках теорії перехідного стану; розробка методики визначення складу порошків та фаз у системі А1-В-С; розробка методики синтезу і рафеноподібного нітриду бору, а також методики селективного визначення вуглецевих наноформ в їх суміші.

**Методи дослідження** - математичне моделювання та експериментальне дослідження параметрів іскрової плазми в повітрі з електродами із нержавіючої сталі; математичне моделювання та експериментальне дослідження мас-спектрів на приладі з високою роздільною здатністю VG9000 при катодному розпиленні монокристалів сапфіру; розрахунки кінетики швидкого розтікання краплі металів по поверхні металів і керамічних матеріалів; аналіз механізму хімічних реакцій боратної кислоти та карбаміду з утворенням ВN; розрахунок зв’язку між діаметром частинок графеноподібного нітриду бору і кількістю вільних зв’язків на периметрі макромолекул, селективне окиснення вуглецевих матеріалів з кулонометричним визначенням СO2. В роботі вперше встановлений кількісний зв’язок між потужністю розряду, швидкістю ерозії багатокомпонентних електродів та тиском, параметрами і складом плазми іскрового розряду та інтенсивністю спектральних ліній атомів, та іонів. Проаналізовано мас-спектр плазми жевріючого розряду та створений атлас молекулярних інтерференцій при аналізу сапфіру, знайдені коефіцієнти відносної чутливості ізотопів. Показано, що кінетика швидкого розтікання краплі може бути описана з використанням уточненої теорії абсолютних швидкостей реакцій.

Запропонована хімічна модель утворення нанорозмірних частинок порошків графеноподібного ВN борато-карбамідного походження. Розглянуто механізм формування двомірної гексагональної гратки графему та графеноподібного ВN при ланцюгових розгалужених реакціях за вільно- радикальними механізмами. Розглянута роль попередників реакцій полімеризації з вільно-радикальними парами при утворення планарних частинок ВN.

Розроблена методика визначення елементного складу порошків боридів алюмінію та вуглецю, а також методика прямого визначення вуглецевих наноформ присутніх як домішки вільного вуглецю у порошках промислового карбіду бору. Розроблена селективна хімічна методика визначення вмісту поперечно-шарових вуглецевих волокон в матеріалах нановуглецю методом окиснення в потоці 02 та кулонометричного вимірювання С02, встановлені температури фази швидкого окиснення ряду вуглецевих наноформ, в тому числі поперечно-шарових графеноподібних нановолокон промислової вуглеграфітової тканини ацетатцелюлозного піролітичного походження.

Запропоновані методики створюють теоретичний фундамент атомно- спектрометричних методів елементного аналізу неорганічних матеріалів, підвищують їх точність та експресність, суттєво розширюють можливості існуючих інструментальних методів атестації вуглецевих наноматеріалів, створюють основу для удосконалення методів синтезу та очистки порошків кераміки на основі додекабориду алюмінію.

**Ключові слова**: ХІМІЧНИЙ АНАЛІЗ, СИСТЕМА АІ-В-С, ГРАФЕНОПОДІБНИЙ ВN МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ, ЕМІСІЙНИЙ СПЕКТРАЛЬНИЙ АНАЛІЗ, САПФІР ВИСОКОЇ ЧИСТОТИ, ІСКРОВИЙ РОЗРЯД, МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, КІНЕТИКА РОЗТІКАННЯ, ТЕОРІЯ ПЕРЕХІДНОГО СТАНУ.

 **ПУБЛІКАЦІЇ**

 Гарбуз В. В. М. Д. Бега, В. А. Петрова, Л. С. Суворова, Л. М. Кузьменко, С. К. Шатских / Вивчення окислення промислових порошків карбіду бору методами хімічного аналізу // Порошковая металлургия. 2014. - № 7/8. - С. 151 - 158.

Жибак Т. М., Бойчук Ю. В.,Бардаков Б. В., Шкотова Л. В., Дуда Т.И.„ Муратов В. Б., Гарбуз В. В., Васільєв О .О., Корпан Я. І., Білоіван О.А. Углеродные наноматериалы: Исследование характеристик и использование в биосенсорной технологии. Наноразмерные системы и наноматериалы: исследования в Украине. / Редколлегия: А. Г. Наумовец (глав. Ред); НАН Украины. - К: Академперіодика, 2014. - 768 с. ил. ISBN 978-966-360-260-8

Суворова Л. С., Петрова В. А., Лобунець Т.Ф., Г арбуз В.В./ Визначення поверхні графеноподібного нітриду бору // Труды ИПМ НАН Украины, Серия «Физико- химические основы технологии порошковых материалов» Современные проблемы физического материаловедения. Выпуск 24. - Киев: 2015. - С.136 - 143.

Гарбуз В. В., Кузьменко Л. М, Суворова Л. С., Петрова В. А., Силинская Т. А., Шацких С. К. / Количественное определение методом избирательного окисления наноформ свободного углерода в порошках карбида бора // Порошковая металлургия. 2016.-№ 1/2. - С.50 - 57.

Kurochkin V.D., Romanenko О.М., Skulsky M.O. Determination of REE and some toxic elements in mine waters of Donetsk region by GD-MS // Methods and objects of chemical analysis, 2014. 9(2). - C.59-64.

Kurochkin V.D. Kravchenko L.P. Numerical Simulation of Impact of the Spark Discharge Parameters and Electrode Material on the Intensity of Spectral Lines in the Emission Spectral Analysis // Methods and objects of chemical analysis, 2015, V.10, N 4-p. 195-201.

 **Патенти**

Мазур П. В., Муратов В. Б., Гарбуз В. В., Картузов Є. В., Васільєв О. О. / Спосіб одержання порошку додекабориду алюмінію А1В12. // Україна. Патент на корисну модель №UA107193U, МПК (2016.01), С01В 35/04(2016.01), подано 26.11.2015, опубліковано 25.05.2016, Бюл.№10.

Мазур П. В., Муратов В. Б., Гарбуз В. В., Картузов Є. В., Васільєв О. О. / Ударостійка кераміка на основі додекабориду алюмінію. // Україна. Патент на корисну модель №UA107259U, МПК (2016.01), С22С 1/04(2016.01), С01В 35/00, B22F 3| 14, С04В 111/20. подано 15.12.2015, опубліковано 25.05.2016, Бюл.№10.