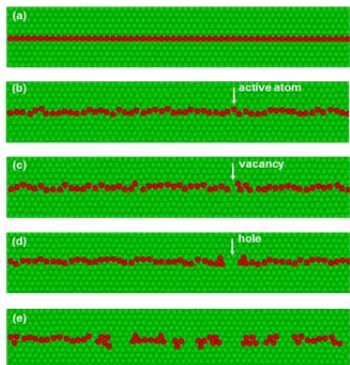


### Най-значимо научно постижение на ИФХ – БАН за 2015 г.

Атомистичен модел и сценарий на термично скъсване на метални моноатомни нановерижки. Развит е атомистичен модел и сценарий на спонтанно скъсване на моноатомна метална нановерижка, разположена върху атомно гладка кристална повърхност. Установен е тристъпален механизъм на скъсване на верижката, който включва: (i) формиране на активни за процеса атоми; (ii) генериране на единични, възстановими атомни ваканции; (iii) образуване на стабилни ваканционни димери, които необратимо прекъсват нановерижката. Предложена е система от кинетични уравнения, описващи развитието във времето на процесите (i-iii), и на тази основа аналитично и чрез атомистични Монте Карло симулации са определени важни, физически значими характеристики като вероятност за поява на единична атомна ваканция, вероятност за поява на ваканционна дупка и време на живот на нановерижката.



Моноатомна нановерижка в пет последователни момента от нейното получаване до пълното и разграждане:

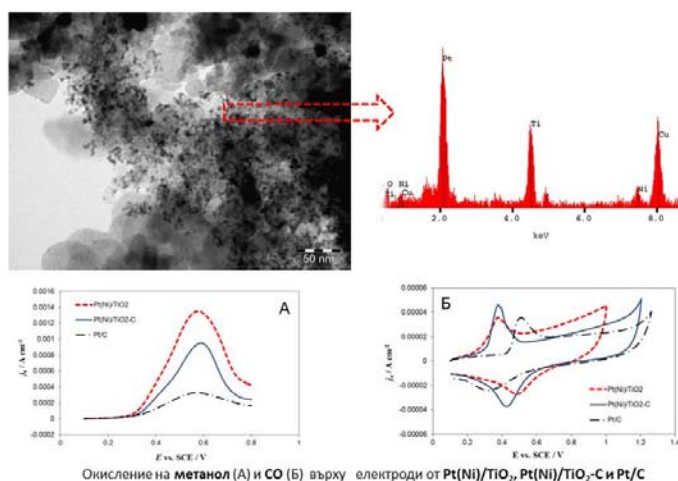
(a) – начална конфигурация; (b) – поява на активни атоми; (c) – поява на първа атомна единична ваканция; (d) – поява на ваканционен димер; (e) – пълен разпад до атомни кълъстери;

M. Michailov and D. Kashchiev, “Monatomic metal nanowires: Rupture kinetics and mean lifetime”, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **70** (2015) 21–27.

### Най-значимо научно-приложно постижение на ИФХ – БАН за 2015 г.

Pt(Ni) електрокатализатори за окисление на метанол, получени чрез галванично заместване върху прахови носители  $\text{TiO}_2$  и  $\text{TiO}_2\text{-C}$ . Изготвени са би-метални катализатори Pt(Ni), с евентуални приложения в горивни клетки чрез двустъпална методика. Върху прахове от  $\text{TiO}_2$  (Degussa® P-25) или смес от  $\text{TiO}_2$  и въглерод (Vulcan XC72R) се нанася безтоково (химично) Ni. След това препаратът се потапя в разтвор на хлороплатинат, където на повърхността на nano-частичките се извършва спонтанно галванично заместване на Ni с Pt. По такъв начин, използвайки много ниски концентрации на Pt се получават материали с каталитични свойства близки или по-добри от комерсиалните Pt катализатори. Сравнението с търговския продукт Pt/C показва, че електродите на основата на получените катализатори Pt(Ni)/ $\text{TiO}_2$  and Pt(Ni)/ $\text{TiO}_2\text{-C}$  притежават по-висока специфична каталитична активност (спрямо електроактивната площ на Pt). Въпреки по-ниската специфична масова активност (в резултат на по-малката повърхност) получените би-метални нанокатализатори са по-евтини, с по-просто приготвяне и по-перспективни от тези с чиста платина. Подобрената специфична каталитична активност се обяснява със синергичния ефект на  $\text{TiO}_2$  за облекчена десорбция на CO от местата на разположение на Pt.

Pt катализатор, получен чрез частично галванично заместване на Ni върху смес от въглеродни и  $\text{TiO}_2$  наночастички.



J. Georgieva, E. Valova, I. Mintsouli, S. Sotiropoulos, D. Tatchev, S. Armyanov, A. Hubin, J. Dille, A. Hoell, V. Raghuwanshi, N. Karanasios, L. Malet, “Pt(Ni) electrocatalysts for methanol oxidation prepared by galvanic replacement on  $\text{TiO}_2$  and  $\text{TiO}_2\text{-C}$  powder supports”, *Journal of Electroanalytical Chemistry* **754** (2015) 65–74.