

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U003697

Державний реєстраційний номер: 0121U111599

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-06-2023

## II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

**Назва етапу:** Квантовохімічний розрахунок електронної і просторової структури олігомерів 3,4-етилendioкситіофену (EDOT) в ступенях окиснення 0, +2 та +4. Встановлення і систематизація симетрійних обмежень, що допускають виникнення направленої руху в ретчет-системах з довільними просторово-часовими залежностями потенціальної енергії. Теоретичне дослідження явища поверхневого плазмонного резонансу в металевих наночастинках

**Початок етапу:** 01.2021

**Закінчення етапу:** 12.2021

**Вид звітнього документа:** Проміжний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, 03164, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380444229632

## 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):** 6541030

|                                                           |
|-----------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 6326.827 |
|-----------------------------------------------------------|

## **VII. Відомості про ДіР**

### **Назва роботи українською:**

Методи сучасного теоретичного моделювання в дослідженнях властивостей наносистем, які задіяні в сонячних елементах третього покоління

### **Назва роботи англійською:**

Methods of modern theoretical modeling in studies of the properties of nanosystems involved in third-generation solar cells

### **Реферат українською:**

Розробка адекватних методів теоретичного опису структури нано-частинок та систем на їх основі, які задіяні в сонячних елементах третього покоління, вивченні залежності їх властивостей від геометричних розмірів та розмірності і створенні відповідного пакету розрахункових модулів; в теоретичному описі властивостей вуглецевих наночастинок: нанотрубок, фулеренів та графеноподібних кластерів.

### **Реферат англійською:**

Development of adequate methods of theoretical description of the structure of nano-particles and systems based on them, which are involved in solar cells of the third generation, study of the dependence of their properties on geometric dimensions and dimensions, and creation of a suitable package of calculation modules; in the theoretical description of the properties of carbon nanoparticles: nanotubes, fullerenes and graphene-like clusters.

**Індекс УДК:** 544 , 544

**Коди тематичних рубрик:** 31.15

### **Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Лобанов Віктор Васильович

**Науковий ступінь:** д.х.н.

**Вчене звання:** професор

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Розрахунки електронної структура комплексів олігомерів 3,4-етілен-діетокситіофену з полістиролсульфоною кислотою

**Назва НТП англійською:** Calculations of the electronic structure of complexes of oligomers of 3,4-ethylene-diethoxythiophene with polystyrene sulfonic acid

**НТП, яку передбачалося створити:**

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

**Отримані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** хімія

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розрахунки електронної структура комплексів олігомерів 3,4-етілен-діетокситіофену з полістиролсульфоною кислотою дозволили встановити, що молекули олігомерів EDOT і SS не залишаються паралельними один одному після полімеризації, а скоріше, зі збільшенням довжини ланцюга, остання поступово вигинається навколо аніонної одиниці SS; розподіл заряду в комплексах олігомерів EDOT і SS свідчить про присутність двох розділених поляронів на двох кінцях ланцюга, а асиметрія в розподілі заряду також передбачає наявність вигнутої спіральної структури утвореного комплексу

**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**

3. Semchuk O.Yu. Kinetic theory of electroconductivity of metal nanoparticles in the condition of surface plasmon resonance / O.Yu.Semchuk, A.A.Biliuk, O.O.Havryliuk, A.I.Biliuk // Applied Surface Science Advances, 2021, V.3, P.100057.

10. М.І. Терєбінська, О.І. Ткачук, А.М. Дацюк, О.В. Філоненко, В.В. Лобанов. Електронна структура комплексів олігомерів 3,4-етілендіетоксі-тіофену з полістирол-сульфоною кислотою // Поверхня. 2021. Т. 13(28). С. 84-94.

## **Х. Заключні відомості**

### **Керівник юридичної особи**

Картель Микола Тимофійович

Д.Х.Н.

### **Перелік осіб-виконавців**

Білюк Анатолій Анатолійович

Варавка Олена Володимирівна

Гаврилюк Олександр Олександрович

(к.ф.-м.н.)

Гребенюк Анатолій Георгійович

(к.х.н., 01.04.18, 02.00.04)

Громовий Тарас Юрійович

(к.х.н., 01.04.18)

Гічан Ольга Іванівна

(к.ф.-м.н.)

Дем'яненко Євгеній Миколайович

(к.х.н.)

Золотаренко Анатолій Дмитрович

(к. х. н.)

Золотаренко Олександр Дмитрович

(к. х. н.)

Каневський Василь Іванович

(к. т. н.)

Карпенко Оксана Сергіївна

(к.х.н., 02.00.04)

Кононенко Валентина Яківна

Корочкова Таїсія Євгенівна

(к.ф.-м.н.)

ЛАГУТА Валентин Миколайович

Машира Василій Олександрович

Мошківська Надія Михайлівна

Міщанчук Олександр Володимирович

Покутній Сергій Іванович

(д.ф.-м.н.)

Розенбаум Віктор Михайлович

(д.ф.-м.н., 01.04.18)

Семчук Олександр Юрійович

(д.ф.-м.н., 01.04.18)

Смірнова Олесь Валентинівна

(к.х.н.)

Теребінська Марія Іванівна

(к.х.н.)

Терець Андрій Дмитрович

Ткачук Ольга Іванівна

(к. х. н.)

Філоненко Оксана В'ячеславівна

(к.х.н.)

Цендра-Боезе Оксана Михайлівна

(к.х.н.)

Шкільов Віктор Петрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

Дацюк Андрій Михайлович

+38 (063) 490-91-20

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

