

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U003700

Державний реєстраційний номер: 0121U111599

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-06-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вивчення адсорбції комплексів олігомерів EDOT:SS на грані Si(001) та встановлення взаємного розміщення енергетичних рівнів ВЗМО та НВМО комплексу EDOT:SS та рівня Фермі кристалічної підкладки р- Si(001). Розробка методів температурно-частотного керування характеристиками пульсуючого броунівського мотора з малими флуктуаціями потенціальної енергії наночастинки.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 6335.425

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:

Отримані методом теорії функціоналу густини з обмінно-кореляційним функціоналом B3LYP у базисному наборі 6-31 G** результати дозволяють зробити висновок, що у високоокисненому (сильно допованому) олігомері 3,4-етилендіокситіофена E124+ провідність забезпечується формуванням двох біполяронів на кінцях ланцюга. Оскільки, з одного боку, зі скороченням ланцюга біполяронні стани стають стабільнішими за стани з розділеними поляронами, а з іншого боку, підвищення ступеня окиснення за однакових інших умов у певному сенсі еквівалентне скороченню ланцюга (в обох випадках ступінь допування зростає), можна очікувати, що наслідком подальшого окиснення олігомерів 3,4-етилендіокситіофену буде зростаюча схильність таких матеріалів до біполяронної провідності. Можна також припустити, що для олігомерів із іншою кількістю ланок 3,4-етилендіокситіофену носіями заряду можуть бути складніші поляронні структури.

Реферат англійською:

The results obtained by the density functional theory method with the B3LYP exchange-correlation functional in the 6-31 G** basis set allow us to conclude that in the highly oxidized (heavily doped) oligomer of 3,4-ethylenedioxythiophene E124+, conductivity is ensured by the formation of two bipolarons at the ends of the chain. Since, on the one hand, with chain shortening, bipolaron states become more stable than states with separated polarons, and on the other hand, an increase in the degree of oxidation, ceteris paribus, is in some sense equivalent to a shortening of the chain (in both cases, the degree of doping increases), it can be expected that the consequence of further oxidation of 3,4-ethylenedioxythiophene oligomers will be the increasing tendency of such materials to bipolaron conduction. It can also be assumed that for oligomers with a different number of 3,4-ethylenedioxythiophene units, charge carriers can be more complex polaron structures.

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: Модель фотохімічного полірування шорсткої поверхні кварцу

Назва НТП англійською: Model of photochemical polishing of a rough quartz surface

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: хімія, фізика

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: модель фотохімічного полірування шорсткої поверхні кварцу, яка використовує ближнє поле, що виникає над цією поверхнею під впливом електромагнітного випромінювання. Модель дозволяє вирішувати завдання прогнозування очікуваних результатів без необхідності проведення трудомістких розрахунків із чисельним розв'язком двовимірного рівняння Гельмгольца. Особливістю моделі є моделювання травлення профілю поверхні кварцу в просторово-частотному просторі. Результати моделювання можна вважати достовірними, якщо середньоквадратичне відхилення неоднорідностей профілю не перевищують 2 нм, а довжина кореляції профілю поверхні набагато менша за довжину хвилі випромінювання, що падає на поверхню.

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

2. M. Terebinska; O. Filonenko; O. Tkachuk; A. Datsiuk; V. Lobanov. Formation of Polaron Bands in Oxidized 3,4-Ethylenedioxythiophene Oligomer // Mater. Proc. – 2022. – Volume 9, Issue 1. – P. 20.

5. Dekhtyar M.L., Rozenbaum V.M. Quadrupole versus dipole photomotors: Symmetry constraints and operating properties // J. Chin. Chem. Soc. 2022 Online published: 02 December <https://doi.org/10.1002/jccs.202200427>.

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)

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 Олеся 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**

