

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U002022

Державний реєстраційний номер: 0121U111599

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-02-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Розрахунки структури поляронних і биполяронних рівн в та зон в забороненій зоні між полімерного комплексу PEDOT:PSS.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

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.): 5759.325

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 результати по теоретичному розгляді властивостей матеріалів, що використовуються в органічних сонячних елементах та їхня інтерпретація показують, що їх квантовохімічне моделювання дає змогу замінити розгляд великих полімерних молекул на їхні нижчі олігомери та оптимально підібрати їхні складові елементи для отримання найвищих значень напруги розімкненого ланцюга. Підсумовуючи отримані дані відносно комплексів атома Fe з моновакансією графенової площини, зазначимо, що (1) зв'язування атома ТМ на графені можна раціоналізувати, виходячи з локальної симетрії координаційного центру та МО ліганду і утвореного комплексу; (2) d-орбіталі атома ТМ можуть змішуватися з МО графену тієї ж симетрії, що призводить до перерозподілу МО за енергією і, як наслідок, до зміни розщеплення в полі ліганду; (3) утворення графеноподібних комплексів з одним атомом Fe можливе лише за рахунок π -зв'язку. Зв'язування з утворенням π -зв'язків виключене через умови симетрії. Встановлено, що найбільшою буде адсорбція епірубіцину (протонованої форми) як на графеновій площині (-209.1 кДж/моль) (див. рис. 3), так і при взаємодії з молекулою фулерену (-121.3 кДж/моль). Найменше значення ентальпії міжмолекулярної взаємодії при взаємодії з фулереном характерне для нейтральної молекули епірубіцину (-38.5 кДж/моль), а при взаємодії з ГП – для моноаніона епірубіцину (-18.7 кДж/моль). Опираючись на одержані результати розрахунків можна прогнозувати, що адсорбція епірубіцину на поверхні нановуглецевих частинок найкраще буде відбуватися у водному середовищі з $\text{pH} < 7$. Величини ширини енергетичної щілини для моделей наночастинок ізоструктурних ZrSiO_4 та BiVO_4 істотно залежать від координаційного оточення атомів бісмуту, а забарвлення виникає при наявності бісмут-кисневих додекаедрів, що узгоджується з експериментальними даними для кристалів. Результати розрахунків свідчать, що розведення ортованадату бісмуту в ізоструктурній матриці циркону підвищує інтенсивність забарвлення пігмента.

Реферат англійською:

The results obtained on the theoretical consideration of the properties of organic solar materials and their interpretation show that their quantum chemical treatment allows replacing the consideration of large polymeric molecules with their lower oligomers and optimally selecting their constituent elements to obtain the highest open circuit voltage values. Summarizing the data obtained for the complexes of Fe atom with graphene plane monovalence, we note that (1) the binding of the TM atom on graphene can be rationalized based on the local symmetry of the coordination center and the MO of the ligand and the formed complex; (2) the d-orbitals of the TM atom can mix with graphene MOs of the same symmetry, which leads to a redistribution of MOs in energy and, as a result, to a change in the splitting in the ligand field; (3) the formation of graphene-like complexes with one Fe atom is possible only through π -bonding. Binding with the formation of π -bonds is excluded due to symmetry conditions. It was found that the highest adsorption of epirubicin (protonated form) was observed both on the graphene plane (-209.1 kJ/mol) and in the interaction with the fullerene molecule (-121.3 kJ/mol). Based on the results of the calculations, it can be predicted that the adsorption of epirubicin on the surface of nanocarbon particles will occur best in an aqueous medium with a $\text{pH} < 7$. The values of the energy band gap width for the models of isostructural ZrSiO_4 and BiVO_4 nanoparticles significantly depend on the coordination environment of bismuth atoms, and the coloration occurs in the presence of bismuth-oxygen dodecahedrons, which is consistent

with experimental data for crystals. The calculation results indicate that dilution of bismuth orthovanadate in the isostructural matrix of zircon increases the intensity of the pigment color.

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: Моделі наночастинок ізоструктурних ZrSiO₄ та BiVO₄

Назва НТП англійською: Models of isostructural ZrSiO₄ and BiVO₄ nanoparticles

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Величини ширини енергетичної щілини для моделей наночастинок ізоструктурних ZrSiO₄ та BiVO₄ істотно залежать від координаційного оточення атомів бісмуту, а забарвлення виникає при наявності бісмут-кисневих додекаедрів, що узгоджується з експериментальними даними для кристалів.

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

1. Havryliuk O., Tkachuk O., Terebinska M., Semchuk O., Biliuk A. Optical characteristics of structures with silicon nanowires and metal nanoparticles // Lithuanian Journal of Physics . – 2024. – Vol. 64, N 1. – P. 40–47

2. Semchuk O.Yu., Havryliuk O.O., Biliuk A.A. Inductive-resonance energy transfer in hybrid carbon nanostructures // Хімія, фізика та технологія поверхні, 2024, 15 (3), 328–339. <https://doi.org/10.15407/hftp15.03.328>

3. Pokutnii S.I. Absorption in nanosystems containing cadmium sulfide nanocrystals in the ultraviolet spectral ranges // Chemical Papers. 2024. 78. P. 1-5 DOI: <https://doi.org/10.1007/s11696-024-03516-0>
4. Філоненко О.В., Гребенюк А.Г., Лобанов В.В. Квантовохімічне дослідження фізико-хімічних характеристик наноматеріалів на основі діоксиду Sn // Поверхня. – 2024. – Вип. 16(31). – С. 3-25.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Туров Володимир Всеволодович

д.х.н., 01.04.18

Перелік осіб-виконавців

Білюк Анатолій Анатолійович

(д.філософ)

Варавка Олена Володимирівна

Гаврилюк Олександр Олександрович

(к.ф.-м.н., 01.04.18)

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., 01.04.18)

Дем'яненко Євгеній Миколайович

(к.х.н., 01.04.18)

Золотаренко Анатолій Дмитрович

(к. х. н.)

Золотаренко Олександр Дмитрович

(к. х. н., 01.04.18)

Каневський Василь Іванович

(к. т. н., 05.27.01)

Корочкова Таїсія Євгенівна

(к.ф.-м.н., 01.04.18)

Кремень Оксана Сергіївна

(к.х.н.)

Машира Василь Олександрович

Мошківська Надія Миколаївна

Місчанчук Олександр Володимирович

Покутній Сергій Іванович

(д.ф.-м.н., 01.04.05)

Семчук Олександр Юрійович

(д.ф.-м.н., 01.04.18)

Смірнова Олеся Валентинівна

(к.х.н., 01.04.18)

Теребінська Марія Іванівна

(к.х.н., 01.04.18)

Терець Андрій Дмитрович

Ткачук Ольга Іванівна

(к. х. н., 01.04.18)

Філоненко Оксана В'ячеславівна

(к.х.н., 01.04.18)

Цендра Оксана Михайлівна

(к.х.н.)

Шкільов Віктор Петрович

Юр'єва Каріна Андріївна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

Гаврилюк Олександр Олександрович

+38 (044) 424-35-67

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

