Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U001450

Державний реєстраційний номер: 0115U000637

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Структурні та спектральні властивості нових матеріалів для сенсибілізованих барвником сонячних елементів, нанофотоніки та органічних світловипромінюючих пристроїв

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0472360324 , 0472372142

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки

Код за ЄДРПОУ: 37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 428.005

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурні та спектральні властивості нових матеріалів для сенсибілізованих барвником сонячних елементів, нанофотоніки та органічних світловипромінюючих пристроїв

Назва роботи англійською:

Structural and spectral properties of new materials for dye sensitized solar cells, nanophotonics and organic light emitting devices.

Реферат українською:

Метою роботи є квантово-хімічні дослідження структури, фотофізичних та напівпровідникових властивостей нових матеріалів для органічних світловипромінюючих пристроїв (ОСВП) та сенсибілізованих барвником сонячних елементів (СБСБ) та встановлення взаємозалежності між будовою молекул та її спектрами поглинання/випромінювання. Об'єкт дослідження - серія органічних сенсибілізуючих барвників для СБСЕ індолінового та трифеніламінового рядів з модифікованими донорними, містковими та акцепторними фрагментами, а також нові високоефективні емітери класу гетероциркуленів (тетраокса[8]циркулени, азаокса[8]циркулени, тіа[8]циркулени), дифеніламінокарбазолів, похідних 1,2,4-триазолу та їх комплексів з перехідними металами та лантанідами, поліпіридильних комплексів Ir(III). Методи дослідження: 1) класичні фізико-хімічні методи, такі як УФ-видима та ІЧ спектроскопія, спектроскопія ЯМР, ЕПР, мас-спектрометрія, порошкова рентгенівська дифрактометрія, рентгено-структурний аналіз, термогравіметричний аналіз, високоточні методики напилення матеріалів тощо; 2) сучасні методи квантової хімії, такі як теорія функціоналу густини - DFT та її нестаціонарний варіант - TDDFT, методи ab initio, такі як RI-CC2 і XMC-QDPT2, теорія Бейдера "Атоми в молекулах" тощо. Основні наукові результати: 1. Встановлено, що молекули гетероциркуленів характеризуються наявністю концентричної системи паратропних (антиароматичних) та діатропних (ароматичних) магнітних кільцевих струмів. 2. Доведено, що інтенсивність першого електронного переходу S0?S1 в спектрах поглинання досліджуваних гетероциркуленів значно зростає за рахунок електронно-коливальних взаємодій. 3. Для серії гетероциркуленів виявлено вплив NH/O заміщення і ступеня спряження на квантовий вихід флуоресценції. В цьому відношенні азатриокса[8]циркулени демонструють значно вищі значення ФFl ніж їх Оксиген-заміщені аналоги. 4. Сконструйовані та протестовані мультишарові OLED пристрої білого кольору свічення на основі бензоанельованих азатриокса[8]циркуленів. 5. Передбачено дві нові поліморфні форми карбон нітриду стехіометрії (1 : 1) просторової групи P3m1, які є напівпровідниками з широкою непрямою забороненою зоною. 6. Створені новітні пристрої органічних світловипромінюючих діодів, які засновані на ексиплексному випромінюванні, що генерується на межі поділу фаз зіркоподібних органічних емітерів (здебільшого циркуленів та похідних карбазолу). 7. Створенні нові високоефективні органічні світлодіоди з блакитним кольором свічення, в яких в якості емісійних матеріалів використані конденсовані похідні бііндолу.

Реферат англійською:

The aim of this work is quantum-chemical studies of the structure, photophysical and semiconductor properties of new materials for organic light-emitting devices (OLED) and dye-sensitized solar cells (DSSC) and establishing the interdependence between the structure of molecules and its absorption/emission spectra. Object of study - series of organic sensitizing dyes for DSSC of indoline and triphenylamine series with modified donor, bridging and acceptor fragments, as well as new high-efficiency emitters of heterocirculenes, diphenylaminocarbazoles, 1,2,4-triazole derivatives and their complexes with transition metals and lanthanides, complexes Ir(III). Research methods: 1) classical physicochemical methods, such as UV-visible and IR spectroscopy, NMR spectroscopy, EPR, mass spectrometry, powder X-ray diffractometry, X-ray diffraction analysis, thermogravimetric analysis, high-

precision deposition techniques and others; 2) modern methods of quantum chemistry, such as density functional theory - DFT and its nonstationary version - TDDFT, ab initio methods such as RI-CC2 and XMC-QDPT2, Beyder's theory of "Atoms in molecules" and others. Main scientific results: 1. It was found that heterocirculene molecules are characterized by the presence of a concentric system of paratropic (anti-aromatic) and diatropic (aromatic) magnetic ring currents. 2. It is proved that the intensity of the first electronic transition S0?S1 in the absorption spectra of the studied heterocirculenes increases significantly due to vibrational interactions. 3. The effect of NH/O substitution and conjugation degree on the fluorescence quantum yield was revealed for a series of heterocirculenes. In this respect, asatrioxa[8]circulenes show significantly higher values the fluorescence quantum yield than their oxygen substituted analogs. 4. Multilayered OLED devices with white color of luminescence based on benzoannelated azatrioxa[8]circulenes were constructed and tested. 5. It was found two new polymorphic forms of carbon nitride stoichiometry (1:1) of the space group P3m1 which are semiconductors with a indirect wide band gap. 6. It was fabricated new organic light-emitting devices, which are based on exciplex radiation generated at the phase boundary of star-shaped organic emitters (mainly circulenes and carbazole derivatives). 8. It was fabricated new high-performance organic light-emitting diodes with a blue color glow, in which the binindole condensed derivatives were used as emission materials.

Індекс УДК: 539.2;538.9-405;548, 544.18 + 544.135 + 544.144 + 544.174.2

Коди тематичних рубрик: 29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мінаєв Борис Пилипович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Структурні та спектральні властивості нових матеріалів для сенсибілізованих барвником сонячних елементів, нанофотоніки та органічних світловипромінюючих пристроїв

Назва НТП англійською: Structural and spectral properties of new materials for dye sensitized solar cells, nanophotonics and organic light emitting devices

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: M72.1 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих та технічних наук, P85.4 - Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У науково-дослідній роботі та циклі статей за її результатами проведено детальний аналіз структури, електронних та спектральних властивостей гетероциркуленів, дифеніламінокарбазолів, похідних 1,2,4-триазолу та їх комплексів з перехідними металами та лантанідами, поліпіридильних комплексів Ir(III), також змодельованих одно- і двовимірних полімерних сполук на основі Нітрогену, циркуленів, карбон-нітрогену, що забезпечує теоретичне обґрунтування створення нових світловипромінюючих пристроїв та цілеспрямованого синтезу нових матеріалів для органічної електроніки та фотоніки.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2015-2017 рр

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти і наукові установи

Перспективні ринки: -

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 2000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація: по договору

IX. Бібліографічний опис

1. Електронна будова та спектральні властивості гетероциркуленів : монографія / Б. П. Мінаєв, Н. М. Карауш, Г. В. Баришніков, В. О. Мінаєва. - Черкаси : Вид. від. ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2017. - 264 с. 2. Мінаєв Б. П. Практикум з навчальної дисципліни "Квантова хімія (будова речовини, хімічний зв'язок)": Навчально-методичний посібник для студентів вищих навчальних закладів / Б. П. Мінаєв, Н. М. Карауш, В. О. Мінаєва, Г. В. Баришніков. - Черкаси : Вид. від ЧНУ імені Богдана Хмельницького, 2016. - 406 с. 3. Baryshnikov G. Theory and calculation of the phosphorescence phenomenon / G. Baryshnikov, B. Minaev, H. Agren // Chem. Rev. - 2017. - Vol. 117 , N 9. - P. 6500-6537. 4. Ivaniuk K. Highly Luminous Sky-Blue Organic Light-Emitting Diodes Based on the Bis[(1,2)(5,6)]indoloanthracene Emissive Layer / K. Ivaniuk, V. Cherpak, P. Stakhira, Z. Hotra, B. Minaev, G. Baryshnikov, E. Stromylo, D. Volyniuk, J. V. Grazulevicius, A. Lazauskas, S. Tamulevicius, B. Witulski, M. E. Light, P. Gawrys, R. J. Whitby, G. Wiosna-Salyga, B. Luszczynska // J. Phys. Chem. C - 2016. - Vol. 120, N 11. - P. 6206?6217. 5. Baryshnikov G. V. Nine-ring angular fused biscarbazoloanthracene displaying a solid state based excimer emission suitable for OLED application / G. V. Baryshnikov, P. Gawrys, K. Ivaniuk, B. Witulski, R. J. Whitby, A. Al-Muhammad, B. Minaev, V. Cherpak, P. Stakhira, D. Volyniuk, G. Wiosna-Salyga, B. Luszczynska, A. Lazauskas, S. Tamuleviciush, J. V. Grazulevicius // J. Mater. Chem. C. - 2016. - Vol. 4, N 24. - P. 5795-5805. 6. Karaush N. N. Computational study of the structure, UV-vis absorption spectra and conductivity of biphenylene-based polymers and their boron nitride analogues / N. N. Karaush, S. V. Bondarchuk, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, W.-H. Sun, B.F. Minaev // RSC Adv. - 2016. - Vol. 6, N 55. - P. 49505-49516. 7. Baryshnikov G. V. Aromaticity of the doubly charged [8]circulenes / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, N. N. Karaush, D. Sundholme, B. F. Minaev // Phys. Chem. Chem. Phys. - 2016. - Vol. 18, N 13. - P. 8980-8992. 8. Baryshnikov G. V. Benzoannelated aza-, oxa- and azaoxa[8]circulenes as promising blue organic emitters / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, N. N. Karaush, V. A. Minaeva, A. N. Sinelnikov, S. K. Pedersen, M. Pittelkow, B. F. Minaev, H. Agren // Phys.Chem.Chem.Phys. - 2016. - Vol. 18, N 40. - P. 28040-28051. 9. Minaev B. Spin-dependent effects in ethylene polymerization with bis(imino)pyridine iron(II) complexes / B. Minaev, A. Baryshnikova, W.-H. Sun // J. Organomet. Chem. - 2016. - Vol. 811. - P. 48-65. 10. Deksnys T. Synthesis and characterisation of carbazole-based bipolar exciplexforming compound for efficient and colortunable OLEDs / T. Deksnys, J. Simokaitiene, J. Keruckas, D. Y. Volyniuk, O. Bezvikonnyi, V. V. Cherpak, P. Y. Stakhira, K. Ivaniuk, I. Helzhynskyy, G. Baryshnikov, B. Minaev, J. V. Grazulevicius // New J. Chem. - 2016. - Vol. 41, N 2. - P. 559-568 11. Karaush N. N. Recent progress in quantum chemistry of hetero[8]circulenes N. N. Karaush, G. V. Baryshnikov, V. A. Minaeva, H. ?gren, B. F. Minaev // Mol. Phys. - 2017. - P. 1-13. 12. Bondarchuk S. V. Super high-energy density single-bonded trigonal nitrogen allotrope - a chemical twin of the cubic gauche form of nitrogen / S. V. Bondarchuk, B.F. Minaev // Phys.Chem.Chem.Phys. - 2017. - Vol. 19, N 9. - P. 6698-6706. 13. Bondarchuk, S. V. Thermally accessible triplet state of ?-nucleophiles does exist. Evidence from first principles study of ethylene interaction with copper species / S. V. Bondarchuk, B. F. Minaev // RSC Advances - 2015. - Vol. 5. - ? 15. - P. 11558-11569. 14. Bondarchuk S.V., Minaev B.F. Two-dimensional honeycomb (A7) and zigzag sheet (ZS) type nitrogen monolayers. A first principles study of structural, electronic, spectral, and mechanical properties. - Comp. Mater. Science - 2017. - Volume 133. - P. 122-129. 15. Baryshnikov G. V. A computational study of aromaticity and photophysical properties of unsymmetrical azatrioxa[8]circulenes / G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, B. F. Minaev, H. Agren // New J. Chem. - 2017. - Vol. 41, N 7. - P. 2717-2723. 16. Karaush N.N., Valiev R.R., Baryshnikov G.V., Minaev B.F., Agren H. DFT simulation of the heteroannelated octatetraenes vibronic spectra with the Franck-Condon and Herzberg-Teller approaches including Duschinsky effect. - Chem. Phys. - 2015. - Volume 459. - P. 65-71. 17. Baryshnikov G.V. Electronic structure, aromaticity and spectra of hetero[8]circulenes / G.V. Baryshnikov; B.F. Minaev; V.A. Minaeva // Russ. Chem. Rev., 2015. - ?. 84. - ?. 455-484. 18. Baryshnikov G. V. Solvatochromic effect in absorption and emission spectra of star-shaped bipolar derivatives of 1,3,5-triazine and carbazole. A time-dependent density functional study / G. V. Baryshnikov, S. V. Bondarchuk, V. A. Minaeva, H. ?gren, B. F. Minaev // J. Mol. Mod. - 2017. - Vol. 23, N 2 - P. 55. 19. Minaev B. F. Spin-orbit coupling mechanism of singlet oxygen a1g quenching by solvent vibrations / B. F. Minaev // Chem.Phys. - 2017.- Vol. 683-684. - P. 84-95. 20. Bondarchuk S. V. Two isomeric solid carbon nitrides with 1:1 stoichiometry which exhibit strong mechanical anisotropy / S. V. Bondarchuk, Boris F. Minaev // New J. Chem. - 2017. - Vol. 41, N 21. - P. 13140-13148. 21. Bondarchuk S. V. Impact sensitivity of crystalline phenyl diazonium salts: A first-principles study

of solid-state properties determining the phenomenon. Int. J. Quant. Chem. - 2017. - Vol.117 N. 21 - P. 1-13.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Черевко Олександр Володимирович

Перелік осіб-виконавців

Баришніков Гліб Володимирович

Бондарчук Сергій Вікторович

Карауш Наталія Миколаївна

Мінаєва Валентина Олександрівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

