

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U103175

Державний реєстраційний номер: 0116U002067

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-02-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Електрон-транспортні та фотоіндуковані процеси у нанорозмірних молекулярних структурах

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, буд. 14-б, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445265998, 380445265362

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, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981, 380442262341, (044) 239-66-72, 2343243, www.nas.gov.ua

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.): 6625.716

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Електрон-транспортні та фотоіндуковані процеси у нанорозмірних молекулярних структурах

Назва роботи англійською:

Electron-transfer and photoinduced processes in nanoscale molecular structures

Реферат українською:

Розвинуто модифіковану суперобмінну модель формування нерезонансного струму через молекулярний провід. Модель пояснює механізм когерентного тунелювання електронів через молекулярні ланцюжки, прикріплені до електродів різноманітними якірними групами. Розроблено модель молекулярного фотодіода, що перетворює енергію тунелюючих електронів в енергію світлових квантів. На основі моделі пропонується кінетичний механізм, що відповідає за формування уніполярної і біполярної електрофлуоресценції. Виявлено важливу роль нелінійних ефектів субстрат-конформаційної взаємодії у ферментативному каталізі і показано, як утворення і зміна режимів функціонування ферменту відбуваються за сценарієм нерівноважних фазових переходів на рівні поодиноких молекул. Дано опис ензиматичної реакції з двома конформаційними каналами і показано, що виникнення оптимального режиму функціонування ферменту має характер фазового переходу 2-го роду. Розвита теорія поглинання енергії магнітної компоненти ультракороткого лазерного імпульсу металевими наночастинками і знайдено залежність цієї енергії від орієнтації магнітного поля відносно осі обертання сфероїда. Запропоновано спосіб виявлення слабких осциляцій в частотній залежності електропровідності металевих наночастинок. Виявлено механізм тунелювання електрона через бар'єр у бінарних InAs/GaAs квантових структурах, в яких є квантовий дріт та квантова точка. Встановлено, що впорядкування атомів домішки приводить до виникнення щілини в енергетичному спектрі електронів. Теоретичні розрахунки добре узгоджуються з оптичними експериментами для цих наноструктур. Проведено моделювання кінетичних характеристик заселеностей станів лінійної системи у широкому діапазоні керуючих параметрів та знайдено точки стохастичного резонансу. У відповідності до експерименту встановлено, що піки кальцієвого струму проявляють властивості гістерезису та підпорядковуються бімодальним розподілам відносно логарифма концентрацій антагоністу.

Реферат англійською:

The modified superexchange model of the formation of a nonresonant current through the molecular wire is developed. The model explains the mechanism of electron tunneling through the molecule attached to electrodes by different anchoring groups. The model of a molecular photodiode which converts the energy of tunneling electrons into the energy of light quanta has been developed. Based on the model, the kinetic mechanism is proposed that is responsible for the formation of unipolar and bipolar electrofluorescence. The important role of the nonlinear effects of the substrate-conformational interaction in enzymatic catalysis was revealed and it is shown how the formation and change of the modes of enzyme functioning occurs according to the scenario of nonequilibrium phase transitions. A description of the enzymatic reaction with two conformational channels is given and it is shown that the appearance of an optimal mode of enzyme functioning has the character of a 2nd-order phase transition. The theory of absorption of the energy of the magnetic component of an ultrashort laser pulse by metal nanoparticles is developed, and the dependence of this energy on the orientation of the magnetic field is found. A method is proposed for revealing weak oscillations in the frequency dependence of the conductivity of metal nanoparticles. The mechanism of electron tunneling through a barrier in binary InAs/GaAs quantum structures with a quantum wire and dot is revealed. It was found that the ordering of impurity atoms leads to the appearance of a gap in the energy spectrum of electrons. The theoretical calculations are in good agreement with optical experiments. The kinetic characteristics of the population of the states of the linear system

are simulated in a wide range of control parameters and the points of stochastic resonance are found. In accordance with the experiment, it was found that the calcium current peaks exhibit hysteresis properties and obey a bimodal distribution.

Індекс УДК: 539.18/.19, 53.01; 53.086; 537.31; 537.6; 538.9; 538.915; 538.93

Коди тематичних рубрик: 29.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Петров Ельмар Григорович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор, член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Електрон-транспортні та фотоіндуковані процеси у нанорозмірних молекулярних структурах

Назва НТП англійською: Electron-transfer and photoinduced processes in nanoscale molecular structures

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розвинуто модифіковану суперобмінну модель формування нерезонансного струму через молекулярний провід. Модель пояснює механізм когерентного тунелювання електронів через молекулярні ланцюжки, прикріплені до електродів різноманітними якірними групами. Розроблено модель молекулярного фотодіода, що перетворює енергію тунелюючих електронів в енергію світлових квантів. На основі моделі пропонується кінетичний механізм, що відповідає за формування уніполярної і біполярної електрофлуоресценції. Виявлено важлива роль нелінійних ефектів субстрат-конформаційної взаємодії у ферментативному каталізу і показано, як утворення і зміна режимів функціонування ферменту відбуваються за сценарієм нерівноважних фазових переходів на рівні поодиноких молекул. Дано опис ензиматичної реакції з двома конформаційними каналами і показано, що виникнення оптимального режиму функціонування ферменту має характер фазового переходу 2-го роду. Розвита теорія поглинання енергії магнітної компоненти ультракороткого лазерного імпульсу металевими наночастинками і знайдено залежність цієї енергії від орієнтації магнітного поля відносно осі обертання сфероїда. Запропоновано спосіб виявлення слабких осциляцій в частотній залежності електропровідності металевих наночастинок. Виявлено механізм тунелювання електрона через бар'єр у бінарних InAs/GaAs квантових структурах, в яких є квантовий дріт та квантова точка. Встановлено, що впорядкування атомів домішки приводить до виникнення щілини в енергетичному спектрі електронів. Теоретичні розрахунки добре узгоджуються з оптичними експериментами для цих наноструктур. Проведено моделювання кінетичних характеристик заселеностей станів лінійної системи у широкому діапазоні керуючих параметрів та знайдено точки стохастичного резонансу. У відповідності до експерименту встановлено, що піки кальцієвого струму проявляють властивості гістерезису та підпорядковуються бімодальним розподілам відносно логарифма концентрацій антагоністу.

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: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Перспективні ринки: Україна, ЄС, США

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

E.G. Petrov. Superexchange nonresonant tunneling current across a molecular wire // JETP Lett. – 2018. – Vol. 108. – No. 5. – P. 322–331.

E.G. Petrov. Modified superexchange model for electron tunneling across the terminated molecular wire // Phys. Stat. Solidi B. – 2019. – Vol. 256. – No. 11. – P. 1900092 (1–16).

E.G. Petrov, Ye.V. Shevchenko, V. Snitsarev, V.V. Gorbach, A.V. Ragulya, S. Lyubchik. Features of superexchange nonresonant tunneling conductance in anchored molecular wires // AIP Advances. – 2019. – Vol. 9. – No. 11. – P. 115120 (1–11).

E.G. Petrov. Barrier and superexchange models for the analysis of tunneling current in molecular junctions "metal-molecular wire-metal" // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. – 2020. – Vol. 18. – No. 3. – P. 649–662.

E.G. Petrov, V.O. Leonov, Ye.V. Shevchenko. Bipolar and unipolar electrofluorescence in a molecular diode // JETP Letters. – 2017. – Vol. 105. – No. 2. – P. 89–97.

E.G. Petrov, V.O. Leonov, Ye.V. Shevchenko. Electrofluorescence polarity in a molecular diode // JETP. – 2017. – Vol. 125. – No. 5. – P. 856–874.

В.О. Леонов, Є.В. Шевченко, Е.Г. Петров. Вплив потенціалу бази на електролюмінесценцію в молекулярній фотодіоді // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. – 2020. – Vol. 18. – No. 2. – P. 227–240.

E.G. Petrov, V.V. Gorbach, A.V. Ragulya, A. Lyubchik, S. Lyubchik. Gate-tunable electroluminescence in Aviram-Ratner-type molecules: Kinetic description // J. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 153. – P. 084105 (1–15).

L.N. Christophorov. Enzyme functioning: Along the lines of nonequilibrium phase transitions // AIP Advances. – 2018. – Vol. 8. – No. 12. – P. 125326 (1–14).

L.N. Christophorov. On the velocity of enzymatic reactions in Michaelis-Menten-like schemes (ensemble and single-molecule versions) // Ukr. J. Phys. – 2020. – Vol. 65. – No. 5. – P. 412–418.

L.N. Christophorov. Peculiarities of random walks with resetting in a one-dimensional chain // J. Phys. A: Math. Theor. – 2021. – Vol. 54. – P. 015001 (1–12).

М.І. Григорчук, Розширення лінії поверхневого плазмонного резонансу в сфероїдальних металевих наночастинках // Журнал Фізичних Досліджень. – 2016. – Т. 20. – № 1/2, С. 1701 (1–9).

М.І. Григорчук, Поведінка лінії поверхневого плазмонного резонансу в металевих наночастинках // Металофізика і Найновіші Технології. – 2016. – Т. 38. – № 6. – С. 717–735.

М.І. Григорчук. Релаксація енергії зв'язку електронів з фононами в металах // Металофізика і Найновіші Технології. – 2017. – Т. 39. – № 11. – С. 1445–1454.

N.I. Grigorchuk. Size and Shape Effect on Optical Conductivity of Metallic Nanoparticle // Eur. Phys. Letters. – 2018. – Vol. 121. – No. 6. – P. 67003 (1–7).

- N.I. Grigorchuk. Influence of the nanoparticle surface and shape on the dipole magnetic absorption of ultrashort laser pulses // *Cond. Matter Phys.* – 2019. – Vol. 22. – No. 3. – P. 33701 (1–13).
- М.І. Григорчук. Модуляція частотної залежності електропровідності металеві наночастинки // *Металофізика і Найновіші Технології.* – 2020. – Т. 42. – № 7. – С. 929–937.
- S.P. Repetsky, I.G. Vyshyvana, S.P. Kruchinin, S. Bellucci. Influence of the ordering of impurities on the appearance of an energy gap and on the electrical conductance of graphene // *Scientific Reports.* – 2018. – Vol. 8. – P. 9123–9130.
- S. Bellucci, S.P. Kruchinin, S.P. Repetsky, I.G. Vyshyvana, R.M. Melnyk. Behavior of the energy spectrum and electric conduction of doped graphene // *Materials.* – 2020. – Vol. 13. – No. 7. – P. 718–731.
- S.P. Repetsky, I.G. Vyshyvana, E.Ya. Kuznetsova, S.P. Kruchinin. Energy spectrum of graphene with adsorbed potassium atoms // *Int. J. Mod. Phys. B.* – 2018. – Vol. 32. – P. 1840030 (1–5).
- G.V. Grushevskaya, G.G. Krylov, H. Choi, S.P. Kruchinin. Electronic properties of twisted bilayer graphene in high-energy k -Hamiltonian approximation // *Modern Physics Letters B.* – 2020. – Vol. 34. – No. 19n20. – P. 2040055 (1–10).
- I. Filikhin, Th. Peterson, B. Vlahovic, S.P. Kruchinin, Yu.B. Kuzmichev, V. Mitic. Electron transfer from the barrier in InAs/GaAs quantum dot-well structure // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* – 2019. – Vol. 114. – P. 113629 (1–5).
- S.P. Kruchinin, S.P. Repetsky, I.G. Vyshyvana. Spin-dependent transport of carbon nanotubes with chromium atoms // *Nanomaterials for security* [ed. by J. Bonca and S. Kruchinin]. – Netherlands: Springer, 2016, P. 67–95. – ISBN 978-94-017-7591-5.
- S. Repetsky, I. Vyshyvana, Y. Nakazawa, S. Kruchinin and S. Bellucci. Electron transport in carbon nanotubes with adsorbed chromium impurities // *Materials.* – 2019. – Vol. 12. – No. 3. – P. 524–554.
- С.П. Репецький, І.Г. Вишивана, С.П. Кручинін, О.Я. Кузнецова, Р.М. Мельник. Вплив упорядкування домішки на енергетичний спектр та електропровідність графену // *Металофіз. новітні технол.* – 2019. – Т. 41. – № 4. – С. 427–443.
- S.P. Repetsky, I.G. Vyshyvana, S.P. Kruchinin, R.M. Melnyk, A.P. Polishchuk Impurity ordering effects on graphene electron properties // *Proceedings of the NATO ARW “Advanced nanomaterials for the detection of CBRN”* [ed. by J. Bonca and S. Kruchinin]. – Netherlands: Springer, 2020. – P. 53–73. – ISBN 978-94-024-2029-6.
- V.I. Teslenko, O.L. Kapitanchuk. Three-stage kinetic model for self-decaying of defects in brittle solids // *J. Nano & Electron. Phys.* – 2020. – Vol. 12. – No. 6. – P. 06001 (1–6).
- O.L. Kapitanchuk, V.I. Teslenko. Modeling the bimodal behavior of self-repairing optical window systems prone to brittle failure // *Phys. Chem. Solid State.* – 2019. – Vol. 20. – No. 3. – P. 269–274.
- V.I. Teslenko, O.L. Kapitanchuk. Competitiveness of nonstationary states in linear kinetic systems // *Mod. Phys. Lett. B.* – 2018. – Vol. 48. – No. 3. – P. 1850022 (1–21).
- O.L. Kapitanchuk, V.I. Teslenko. Maximizing performance of optoelectronic system through minimizing its sensibility to brittle failure // *Mol. Cryst. Liquid Cryst.* – 2018. – Vol. 670. – No. 1. – P. 119–133.
- V.I. Teslenko. Fourth-order differential equation for a two-stage absorbing Markov chain with a stochastic forward transition probability // *Ukr. J. Phys.* – 2017. – Vol. 62. – No. 4. – P. 349–361.
- V.I. Teslenko, E.G. Petrov. Regularization of environment-induced transitions in nanoscopic systems // *Ukr. J. Phys.* – 2016. – Vol. 61. – No. 7. – P. 627–647.
- E. Petrov, V. Teslenko. Kinetics framework for nanoscale description of environment-induced transition processes in biomolecular structures // *Nanobiophysics: Fundamentals and Applications* [ed. by V.A. Karachevtsev]. – Singapore: Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., 2016. – P. 267–293. – ISBN 978-981-46-1396-5.

S. Snegir, Y.J. Dappe, O.L. Kapitanchuk, D. Coursault, E. Lacaze. Kinked row-induced chirality driven by molecule–substrate interactions // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2020. – Vol. 22. – No. 14. – P. 7259–7267.

A. Khodko, V. Khomenko, Y. Shynkarenko, O. Mamuta, O. Kapitanchuk, D. Sysoiev, N. Kachalova, T. Huhn, S. Snegir. Ultrafast ring-closing reaction dynamics of a photochromic furan-based difurylene // Chem. Phys. Lett. – 2017. – Vol. 669. – P. 156–160.

O.L. Kapitanchuk. A quantum–chemical study of conformational and electronic properties of ter-anthrylene-ethynylene derivatives in neutral and ionized states // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2016. – Vol. 639. – P. 55–63.

O.L. Kapitanchuk, O.M. Marchenko, V.I. Teslenko. Hysteresis of transient populations in absorbing-state systems // Chem. Phys. – 2016. – Vol. 472. – P. 249–261.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Загородній Анатолій Глібович

д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Герасименко Ірина Миколаївна

Горощенко Сергій Якович

(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Григорчук Микола Іванович

(д.ф.-м.н., 01.04.02)

Капітанчук Олексій Леонідович

(д.ф.-м.н., 01.04.02)

Кручинін Сергій Павлович

(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Леонов Володимир Олександрович

(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Тесленко Віктор Іванович

(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Христофоров Леонід Миколайович

(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Шевченко Євген Віталійович

(к. ф.-м. н., 01.04.02)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Шевченко Є.В.

Телефон

+38 (044) 521-31-74

Реєстратор

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

