

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U102099

Державний реєстраційний номер: 0119U101739

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-12-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Взаємозв'язок локальної структури і динаміки сумішей IP / молекулярний розчинник з фотодинамікою барвника

Початок етапу: 09.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0577051247

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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): 220 1020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 60

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Високоєфективні фотоелектричні сонячні елементи на основі нових барвників-сенсibilізаторів.
Молекулярний дизайн та оптимізація фотоіндукованих процесів

Назва роботи англійською:

High-performance photovoltaic solar cells based on new dye-sensitizers. Molecular design and optimization of photoinduced process

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – теоретичні та експериментальні методи дослідження та дизайну органічних сполук придатних до використання в сонячних елементах; вплив структурних характеристик органічних сполук на спектральні властивості. Барвники C153, C102, 4-ANMP і PRODAN у BmimBF₄, а також у сумішах BmimBF₄ / ПК з молярною часткою іонної рідини 0,65 і 0,85. Мета роботи – оптимізація складу системи: «широкозонний оксидний напівпровідник – барвник-сенсibilізатор – іонна рідина / молекулярний розчинник» з метою підвищення коефіцієнту корисної дії сенсibilізованих барвником сонячних елементів та покращання їх експлуатаційних характеристик шляхом синтезу нових барвників та прогнозу їх електронно-спектральних характеристик. Дослідити зондову залежність динаміки сольватації в сумішах іонна рідина / молекулярний розчинник.

Реферат англійською:

Object of study - theoretical and experimental methods of research and design of organic compounds suitable for use in solar cells; influence of structural characteristics of organic compounds on spectral properties. Dyes C153, C102, 4-ANMP and PRODAN in BmimBF₄ as well as in BmimBF₄ / PC mixtures with an ionic molar fraction liquids 0.65 and 0.85. The purpose of the work is to optimize the composition of the system: "wide-band oxide semiconductor - dye-sensitizer - ionic liquid / molecular solvent" in order to increase the efficiency of dye-sensitized solar cells and improve their performance by synthesis of new dyes and synthesis of new dyes.

Індекс УДК: 544.52, 544.52 + 541.136

Коди тематичних рубрик: 31.15.29.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Калугін Олег Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Взаємозв'язок локальної структури і динаміки сумішей IP / молекулярний розчинник з фотодинамікою барвника

Назва НТП англійською: Relationship between local structure and dynamics of RTIL / molecular solvent mixtures with dye photodynamics.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Альтернативна енергетика

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Зондова залежність динаміки сольватації у BmimBF₄ і сумішах BmimBF₄ /пропіленкарбонат була досліджена з використанням зондів C153, C102, PRODAN і 4-ANMP. Проводилися вимірювання флуоресценції TCSPC з розділенням у часі (кінетичний режим TRES, а також анізотропія флуоресценції) і вимірювання стаціонарного поглинання та флуоресценції. Квантово-хімічні розрахунки дипольних моментів в основному і збудженому стані, порівняння геометрій рівноваги S₀ і S₁ були виконані, щоб допомогти інтерпретації експериментальних результатів. Основними факторами, які відповідають за динаміку сольватації та інші відмінності фотофізичних властивостей іонних рідин і сумішей іонна рідина / молекулярний розчинник, є: (i) відмінності в дипольному моменті в основному стані, збудженому стані і зміні дипольного моменту при збудженні внаслідок існування вільних зарядів в іонних рідинах; (ii) кут між дипольними моментами основного та збудженого станів, який призводить до зміни балансу ролей поступальних/обертальних рухів у динаміці сольватації; (iii) релаксація геометрії при збудженні, масштаб часу якої явно залежить від розчинника, але величина та час до сих пір не зрозумілі; (iv) специфічні взаємодії між молекулою зонда та іонною рідиною, такі як водневий зв'язок і π-укладка; (v) переважна сольватація молекулярним розчинником або компонентами іонних рідин у сумішах, яка безпосередньо впливає на склад сольватаційної оболонки та її реорганізацію після збурення. Стоксієвське зміщення різних зондів узгоджується з тенденцією зміни дипольного моменту, за винятком 4-ANMP, який показує високе стоксієвське зміщення, можливо, через його невеликий розмір. Усі сольватаційні зонди демонструють подібну неекспоненціальну динаміку сольватації, яку можна моделювати за допомогою бі- або триекспоненціальних функцій. Усі зонди демонструють однакову тенденцію середнього часу та часу сольватації компоненти у складі суміші. Сольватаційні відгуки C102 і C153 були ідентичні у нашому експерименті.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 09.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

д. ф.-м. н., 01.04.03, 03.00.02

Перелік осіб-виконавців

Іванов Володимир Венедиктович

(д. х. н., 02.00.04)

Кириченко Олександр Анатолійович

(д. ю. н., 12.00.09)

Коваленко Сергій Миколайович

(д. х. н., 15.00.02)

Колесник Ярослав Валентинович

Відповідальний за підготовку

Собоан Н.В.

облікових документів

Телефон

+38 (066) 803-49-28

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності

