

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0220U101167

**Державний реєстраційний номер:** 0119U100186

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 04-01-2020

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Синтез об'ємних полімерних нанокompозитів поліетилену, полівінілхлориду, фізично модифікованих барвниками, графенами, фулеренами.

**Початок етапу:** 01.2019

**Закінчення етапу:** 12.2019

**Вид звітнього документа:** Проміжний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 2393141

## 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, Київ, 01135, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Кабінет Міністрів

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380444813221

## VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

**Підстава для проведення ДіР:** 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201290

|                                                        |
|--------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 989.8 |
|--------------------------------------------------------|

## **VII. Відомості про ДіР**

### **Назва роботи українською:**

Встановлення механізмів підвищення контактної електропровідності в радіаційно функціоналізованих полімерних композитах із п-спряженими модифікаторами.

### **Назва роботи англійською:**

Installation of mechanisms for increasing contact electrical conductivity in radiation-functionalized polymer composites with n-conjugate modifiers.

### **Реферат українською:**

Об'єкт дослідження – об'ємні та плівкові структуровані і радіаційно функціоналізовані полімерні композити, наповнені металевими частинками, вуглецевими нанотрубками та присадками з  $\pi$ -спряжених матеріалів. Мета роботи – визначення структурної перебудови в полімерах внаслідок їх модифікації  $\pi$ -спряженими наповнювачами і радіаційної функціоналізації та встановлення механізмів транспорту носіїв заряду в даних композитах. Методи дослідження – морфологічні, структурні, оптичні, механічні, термомеханічні, діелектричні, електропровідності, електронного опромінення, комп'ютерного моделювання. Проведено дослідження ступеня кристалічності, динамічних модулів пружності і зсуву при частоті механічних напружень  $\sim 1$  МГц, спектрів комбінаційного розсіяння світла (КРС), фотолюмінесценції (ФЛ) в полімерних композитах поліетилену низької густини (ПЕНГ) та полівінілхлориду (ПВХ) з барвником метиленовим голубим (МГ) після радіаційної функціоналізації. Встановлено, що, внесення модифікатора МГ призводить до формування полієнових структур в композитах та їх перебудови внаслідок зшивання та деструкції, відповідно. Вперше отримано композити на основі ароматичного фтормісного поліаміду і пластинок графену. Проведено квантово-хімічні розрахунки системи "фрагмент поліаміду + смужка графену", розраховано граничні і близькі молекулярні орбіталі (МО) та розподіл спінової густини. Запропоновано механізм електропровідності, що ґрунтується на стековій взаємодії між складовими композитів. Встановлено зменшення значення порогу перколяції в полімерних композитах з металевими частинками за рахунок високої локальної концентрації наповнювача в стінках провідного каркасу композиту з сегрегованим типом розподілу наповнювача.

### **Реферат англійською:**

Object of the study - three-dimensional and film-structured and radiation-functionalized polymer composites filled with metal particles, carbon nanotubes and additives of  $\pi$ -conjugated materials. The purpose of the work is to determine the structural restructuring in polymers due to their modification by  $\pi$ -coupled fillers and radiation functionalization and to establish the mechanisms of charge carrier transport in these composites. Research methods - morphological, structural, optical, mechanical, thermomechanical, dielectric, electrical conductivity, electron irradiation, computer simulation. The degree of crystallinity, dynamic modulus and shear at mechanical stress frequency of  $\sim 1$  MHz, Raman spectra, photoluminescence (PL) in low density polyethylene (PEN) and polyvinyl chloride (PVH) polymer composites were investigated. ) after radiation functionalization. It is established that the introduction of the MG modifier leads to the formation of polyene structures in composites and their rearrangements due to crosslinking and destruction, respectively. Composites based on aromatic fluorine polyamide and graphene plates were first obtained. Quantum-chemical calculations of the system " polyamide fragment + graphene band " were performed, boundary and near molecular orbitals (MO) and spin density distribution were calculated. An electrical conductivity mechanism based on stack interaction between composite components is proposed. A decrease in the value of percolation threshold in polymer composites with metal particles due to the high local concentration of the filler in the walls of the conductive frame of the composite with a segregated type of distribution of the filler is established.

**Коди тематичних рубрик:**29.01

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Куліш Микола Полікарпович

**Науковий ступінь:** д. ф.-м. н.

**Вчене звання:** професор

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Рекомендації по створенню об'ємних полімерних композитів.

**Назва НТП англійською:** Recommendations for the creation of bulk polymer composites.

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** нові наукові дані

**Галузь застосування:** 72. Наукові дослідження та розробки

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Проведено дослідження ступеня кристалічності, динамічних модулів пружності і зсуву при частоті механічних напружень ~1 МГц, спектрів комбінаційного розсіяння світла (КРС), фотолюмінесценції (ФЛ) в полімерних композитах поліетилену низької густини (ПЕНГ) та полівінілхлориду (ПВХ) з барвником метиленовим голубим (МГ) після радіаційної функціоналізації. Встановлено, що, внесення модифікатора МГ призводить до формування полієнових структур в композитах та їх перебудови внаслідок зшивання та деструкції, відповідно. Вперше отримано композити на основі ароматичного фтормісного поліаміду і пластинок графену. Проведено квантово-хімічні розрахунки системи "фрагмент поліаміду + смужка графену", розраховано граничні і близькі молекулярні орбіталі (МО) та розподіл спінової густини. Запропоновано механізм електропровідності, що ґрунтується на стековій взаємодії між складовими композитів. Встановлено зменшення значення порогу перколяції в полімерних композитах з металевими частинками за рахунок високої локальної концентрації наповнювача в стінках провідного каркасу композиту з сегрегованим типом розподілу наповнювача.

**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:** 01.2019

**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**

1 розділ монографії, 6 статей, 12 матеріалів та 11 тез доповідей на наукових конференціях.

## **X. Заключні відомості**

**Керівник юридичної особи**

Мартинюк Віктор Семенович

д. б. н., 03.00.02

**Перелік осіб-виконавців**

Александров Максим Андрійович

Гончаренко Надія Анатоліївна

Дмитренко Олена Петрівна

(д. ф.-м. н.)

Куліш Микола Полікарпович

(д. ф.-м. н.)

Курочка Лілія Іванівна

Місюра Андрій Іванович

Онанко Анатолій Петрович

(к. ф.-м. н.)

Пінчук-Ругаль Тетяна Миколаївна

(к. ф.-м. н.)

Рожковський Олександр Миколайович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Бурих А.А.

**Телефон**

+38 (044) 239-31-88

**Реєстратор**

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

