Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0216U008026

Державний реєстраційний номер: 0110U007542

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-04-2016

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Електронні, магнітні та кінетичні властивості молекулярних наносистем та неорганічних нанокластерів

Початок етапу: 01.2011

Закінчення етапу: 12.2015

Вид звітного 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:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 521-34-23 , 526-59-98

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4031

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Електронні, магнітні та кінетичні властивості молекулярних наносистем та неорганічних нанокластерів

Назва роботи англійською:

Electronic, magnetic and kinetic properties of molecular nanosystems and inorganic nanoclusters

Реферат українською:

За допомогою сучасних методів квантової механіки молекул досліджено процеси формування перехідних і стаціонарних струмів, фотострумів, а також електролюмінесценції у системі "електрод-молекула-електрод". З'ясовано визначну роль в цих процесах непружного дистанційного (тунельного) переносу електронів та стрибкового електронного транспорту. Показано, що перехідні процеси, пов'язані зі швидким перемиканням різниці потенціалів, значно підсилюються при збільшенні асиметрії зв'язків молекули з електродами. З'ясована роль триплетного стану в формуванні великих пікових значень перехідного фотоструму при сильній обмінній взаємодії у молекулі. На прикладі багатофазної ліганд-рецепторної структури знайдено константу швидкості переходів між її енергетичними рівнями. Встановлено, що коефіцієнт переваг вихідного стану відносно кооперативності обмежується знизу величиною 2/e. Зроблено висновок, що перехід коефіцієнту через граничне значення є критичним і призводить до розпаду стабільності необоротної системи. Змодельовані конформаційні властивості та електронні характеристики низки новітніх молекулярних комплексів, перспективних щодо використання в наноелектрониці. Для терфенілтіазол-похідної молекули діарилетену досліджено зміни електронних характеристик внаслідок конформаційного фотоперемикання. Обгрунтовано експериментальний ефект перемикання електричним полем окремої молекули в моношарі.

Реферат англійською:

The processes of formation of both stationary and transient currents, photocurrent as well as electroluminescence in the "electrode-molecule-electrode" system are studied using modern methods of molecular quantum mechanics. The decisive role of both inelastic distant (tunnel) electron transfer and sequential electron transport is determined for these processes. It is shown that asymmetry of the molecule-electrodes coupling considerably intensifies the transient processes caused by fast switching of voltage bias. The role of triplet state in a formation of high peak values of transient photocurrent through the molecule with large exchange interaction is cleared. Using multi-phase ligand-receptor structure as an example, it is found the constant of transition rate between the structure's energy levels. It is shown, that the log odds of the output state in respect to cooperativity of the transient process is fractional being bounded from below by the 2/e value. Moreover, approaching the log odds to this value is critical and leads to the break in stability of irreversible system. The modeling of conformational properties and electronic characteristics is done for a set of novel molecular complexes that are considered as promising materials in nanoelectronics. Changes of electronic properties due to conformational photoswitching are studied for terphenilethiazole-derivative of diarylethen molecule. The justification is found for experimental effect of switching of single molecule in monolayer by electric field.

Індекс УДК: 530.1:51-72, 537.31, 537.37, 538.915, 538.93, 539.21

Коди тематичних рубрик: 29.05.03

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: Електронні, магнітні та кінетичні властивості молекулярних наносистем та неорганічних нанокластерів

Назва НТП англійською: Electronic, magnetic and kinetic properties of molecular nanosystems and inorganic nanoclusters

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В рамках НДР було, зокрема, досліджено процеси формування перехідних і стаціонарних струмів, фотострумів, а також електролюмінесценції у системі "електрод-молекула-електрод". Показано, що перехідні процеси, пов'язані зі швидким перемиканням різниці потенціалів, значно підсилюються при збільшенні асиметрії зв'язків молекули з електродами. На прикладі багатофазної ліганд-рецепторної структури знайдено константу швидкості переходів між її енергетичними рівнями. Встановлено, що коефіцієнт переваг вихідного стану відносно кооперативності обмежується знизу величиною 2/e. Змодельовані конформаційні властивості та електронні характеристики низки новітніх молекулярних комплексів, перспективних щодо використання в наноелектрониці. Для терфенілтіазол-похідної молекули діарилетену досліджено зміни електронних характеристик внаслідок конформаційного фотоперемикання. Обгрунтовано експериментальний ефект перемикання електричним полем окремої молекули в моношарі.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 2016
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції: Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Перспективні ринки: Україна, Россія, ЄС, США

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**
- **Наявність бізнес-плану:**
- **Техніко-економічне обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

IX. Бібліографічний опис

33 статей, 46 тез конференцій

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Загородній Анатолій Глібович
д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Горощенко Сергій Якович

Зелінський Ярослав Романович

Капітанчук Олексій Леонідович

Леонов Володимир Олександрович

Петров Ельмар Григорович

Тесленко Віктор Іванович

Шевченко Євген Віталійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності