

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U104207

Державний реєстраційний номер: 0120U104106

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-12-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Хімічна інженерія та нові ЛХРК матеріали. Теорія нано- та мікромасштабного упорядкування у LCLC.

Початок етапу: 10.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 46, м. Київ, Київська обл., 03680, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445251220, 380445251589

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, Київська обл., 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 3000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Гнучкі друковані сенсори вологості на основі ліотропних хромонічних рідких кристалів.

Назва роботи англійською:

Flexible Printable Humidity Sensing Elements on Lyotropic Chromonic Liquid Crystals.

Реферат українською:

Метою роботи було – встановити основні фізичні властивості ліотропних хромонічних рідких кристалів, а саме, механізми агрегації, орієнтаційного упорядкування, фазові перетворення, електричні властивості. При виконанні проекту були застосовані сучасні експериментальні методи дослідження: спектрального аналізу, що забезпечують з'ясування відповідних фізичних механізмів та процесів в умовах необхідної чистоти досліджуваних об'єктів. При теоретичних дослідженнях і комп'ютерних розрахунках були застосовувані методи, які гарантують достатню точність і надійність результатів. Було проведено дослідження, які стосуються спектральної поведінки хромонічних молекул в полярних та неполярних розчинниках. Визначено умови та пороги (по концентрації) молекулярної агрегації, встановлено структуру агрегатів. Показано результати квантово-хімічних розрахунків, а саме оптимізована рівноважна геометрія молекул досліджуваних речовин в основному та збудженому станах, енергії переходу електронів та сили осциляторів, а також візуалізація результатів здійснювалися за допомогою програм HyperChem, Gaussian та GaussianView. Була розглянута модель взаємодії дисків та аналітично отримано точну канонічну статсуму твердих дисків у вузький квазі-одновимірній порі заданої довжини і ширини. Аналітично знайдено тиск вздовж і поперек пори, розподіл повздовжних контактних відстаней і поперечних координат дисків. Показано, що перехід від щільного до рідинного стану є досить різким, але сингулярності немає; дефекти зникають лише у щільному зігзагу подібно до поведінки дефектів у переході Костерліц-Таулеса. Отримані результати передбачається застосувати для розроблення практичних рекомендацій та створення фізичних основ для нових електронних технологій, в тому числі для побудови прототипів гнучких сенсорних пристроїв на основі самоупорядкованих молекулярних плівок.

Реферат англійською:

The aim of the work was to establish the basic physical properties of lyotropic chromonic liquid crystals, namely, the mechanisms of aggregation, orientational ordering, phase transformations, and electrical properties. During the project, modern experimental research methods were used: spectral analysis, which provides clarification of the relevant physical mechanisms and processes in the conditions of the required purity of the studied objects. In theoretical research and computer calculations, methods have been used that guarantee sufficient accuracy and reliability of the results. Studies on the spectral behavior of chromonic molecules in polar and nonpolar solvents have been performed. Conditions and thresholds (by concentration) of molecular aggregation are determined, the structure of aggregates is established. The results of quantum chemical calculations are shown, namely the optimized equilibrium geometry of molecules of the investigated substances in the ground and excited states, electron transition energy and oscillator power, as well as visualization of the results were performed using HyperChem, Gaussian and GaussianView programs. The disk interaction model was considered and the exact canonical stats of hard disks in a narrow quasi-one-dimensional pore of a given length and width was analytically obtained. The pressure along and across the pores, the distribution of longitudinal contact distances and transverse coordinates of the disks were found analytically. It is shown that the transition from the dense to the liquid state is quite abrupt, but there is no singularity; the defects disappear only in a dense zigzag, similar to the behavior of defects in the Kosterlitz-Taules transition. The obtained results are supposed to be used for development of practical recommendations and creation of physical bases for new electronic technologies, including for construction of prototypes of flexible sensor devices on the basis of self-ordered molecular films.

Індекс УДК: 532.738; 548Ф14

Коди тематичних рубрик: 29.17.25

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Назаренко Василь Геннадійович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові наукові дані про виготовлення гнучких сенсорів вологості, дешевих сонячних елементів, радіочастотних ідентифікаційних марок (трансподерів), електронних штрих-кодів, чи активних матричних елементів для дисплеїв.

Назва НТП англійською: New scientific information about very promising for the manufacture of flexible humidity sensors, cheap solar cells; radio frequency identification marks (transponders), electronic barcodes, or active matrix elements for displays.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджено два типи барвників. А саме, аніонні: Na (2327) та амонієва (2334) солі перилен тетракарбокських похідних, хромоглікат натрію (хромолін) та барвники Blue 27 та Violet 20. До другого типу належить незаряджений антрахіноновий барвник D4. Речовини мають різну розчинність у воді та анізотропному середовищі (для D4). Оптичні вимірювання поглинання на розведених розчинах показують, що агрегація відбувається при будь-яких концентраціях, с, а середнє число агрегації зростає зі збільшенням концентрації. Квантово-хімічні розрахунки, а саме оптимізована рівноважна геометрія молекул досліджуваних речовин в основному та збудженому станах, енергії переходу електронів та сили осциляторів, а також візуалізація результатів здійснювалися за допомогою програм HyperChem, Gaussian та GaussianView. Проведено квантово-механічні розрахунки хромонічних молекул, що складаються з двох гетероциклів, які є л-електронними системами і можуть розглядатися як два елементарні хромофори/флуорофори; гетероцикли зв'язані між собою вуглеводневим містком. Показано, що в стабільних агрегатах на основі л-електронних систем мономерні молекули розташовані на віддалі 3.4 Å ("товщина" електронної системи, наприклад, в J- та H-агрегатах чи в ДНК між основами в спіралях). Аналітично отримано точну канонічну статсуму твердих дисків у вузькій квазі-одновимірній порі заданої довжини і ширини. Аналітично знайдено тиск вздовж і поперек пори, розподіл повздовжніх контактних відстаней і поперечних координат дисків. Показано, що перехід від щільного до рідинного стану є досить різким, але сингулярності немає. Дефекти зникають лише у щільному зігзагу подібно до поведінки дефектів у переході Костерліц-Таулеса.

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: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Інститут фізики НАН України, Інститут фізики напівпровідників НАН України, Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Перспективні ринки: Китайська Народна Республіка, Республіка Корея

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

A. Glushchenko, O. P. Boiko, B.Ya. Lenyk, A. Senenko, and V. G. Nazarenko, Humidity sensing with printable films of lyotropic chromonic liquid crystals, Applied Phys. Lett. 117, 071902 (2020), DOI: 10.1063/5.0008203.

V. M. Pergamenshchik, Analytical canonical partition function of a quasi-one-dimensional system of hard disks, J. Chem. Phys. 153, 144111 (2020).

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Бондар Михайло Віталійович

д. ф.-м. н., 01.04.07

Перелік осіб-виконавців

Булуй Олександр Григорович

Вахнін Олександр Юрійович

Кадашук Андрій Костянтинович

(к. ф.-м. н.)

Курийоз Юрій Іванович

(к. ф.-м. н.)

Марченко Олександр Анатолійович

(д. ф.-м. н.)

Назаренко Василь Геннадійович

(д.ф.-м.н., 01.04.15)

Пергаменщик Віктор Михайлович

(д. ф.-м. н.)

Сененко Антон Ігорович

(к. ф.-м. н.)

Терещенко Олександр Григорович

Черепанов Всеволод Володимирович

(к. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Машкіна В.Л.

Телефон

+38 (044) 525-55-79

Реєстратор

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

