Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U007049

Державний реєстраційний номер: 0114U002925

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-01-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вплив структури координаційних сполук молекулярної і полімерної будови на ефективність переносу енергії і електрона в люмінесцентних і фотовольтаїчних системах на їх основі

Початок етапу: 04.2014

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417213

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 525-11-90, 525-62-16

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.): 200

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив структури координаційних сполук молекулярної і полімерної будови на ефективність переносу енергії і електрона в люмінесцентних і фотовольтаїчних системах на їх основі

Назва роботи англійською:

The influence of structure of coordination compounds possessing molecular and polymeric structure on the efficiency of energy and electron transfer in luminescent and photovoltaic systems based hereon

Реферат українською:

Було синтезовано ряд нових координаційних полімерів і супрамолекулярних ансамблів, визначено їх магнітні, спектральні, люмінесцентні і редокс-характеристики. Встановлено, що супрамолекулярна система, побудована на основі металакраунів з іонами Ho3+ та Cu2+, поєднаних трис-оксалатохроматом, проявляє властивості, характерні для молекулярних магнетиків. Знайдено, що при координації до іону Zn2+ лігандів, що містять бензімідазольні, тіофенові групи або заміщені тіазолотіазоли, у більшості досліджених випадків відбувається батохромний зсув, виникає смуга переносу заряду, що має сприяти фотовольтаїчній активності таких систем. Вперше встановлено, що фрагмент бензімідазолу здатен виступати донором електрону в фотовольтаїчних комірках. Серед досліджених комплексів найбільшу фотовольтаїчну активність має комплекс цинку з лігандом, що містить фрагмент трифеніламіну. На основі дослідження ряду комплексів Gd3+, Eu3+ та Tb3+ з трис-піразолілборатними лігандами, які мають будову супрамолекулярного координаційного полімеру, показано, що в таких системах енергія збудження здатна переноситись від сайту поглинання кванту світла до емітуючого центру на великі відстані за рахунок p-стекінг взаємодій в 1D ланцюгу.

Реферат англійською:

It was synthesized a series of new coordination polymers and supramolecular ensembles defined by their magnetic, spectral, luminescent and redox properties. It was established that the supramolecular system is based on metalocrown ions Ho3 + and Cu2 +, combined by tris-oksalatochromate, exhibits properties of molecular magnets. Found that ligands containing benzimidazole, thiophene groups or substituted tiazolotiazole and coordinated to Zn2 + ion in most cases is showed bathochromic shift, charge transfer band also can appeared, which should contribute to the activity of photovoltaic systems. For the first time it is found that benzimidazole fragment is able to act as electron donor in photovoltaic cells. Among the studied systems zinc complex with ligand containing triphenylamine fragment reveaked the best photovoltaic activity. Based on the study of a number of complexes Gd3 +, Eu3 + and Tb3 + with tris-pirazolylborate ligands that revealed the structure of supramolecular coordination polymers it is shown that in such systems the excitation energy is able to be transferred from the site of absorption of a photon to the emitting center over long distances by p-stacking interactions along 1D chain.

Індекс УДК: 546, 546.

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Павліщук Віталій Валентинович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методики отримання комплексних сполук, що проявляють люмінесцентні, фотовольтаїчні властивості або властивості молекул-магнетиків

Назва НТП англійською: Methodics to directed formation of complex compounds which possessed luminescent, photovoltaic or single-magnet properties

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. Фізико-неорганічна хімія.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Продукція являє собою відомості про: 1) металакраун з іонами Ho3+ та Cu2+, поєднаних трис-оксалатохроматом, що проявляє властивості, характерні для молекулярних магнетиків; 2) незаміщений фрагмент бензімідазолу може виступати у якості донору в фотовольтаїчних системах; 3) в комплексах Gd3+, Eu3+ та Tb3+ з трис-піразолілборатними лігандами енергія збудження здатна переноситись від сайту поглинання кванту світла до емітуючого центру на великі відстані за рахунок p-стекінг взаємодій в 1D ланцюгу.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: хімічна промисловість

Перспективні ринки: Україна,СНД

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

тези 2 доповідей по результатах виконання проекту

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кошечко Вячеслав Григорович
д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Колотілов С.В.

Литвиненко А.С.

Міхальова О.А.

Павліщук В.В.

Полунін Р.А.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності