

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000476

Державний реєстраційний номер: 0124U003998

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дизайн та теоретичні (DFT) дослідження донорно-акцепторних випромінювачів, які потенційно демонструють TADF/RTP та SSLE з рівнями енергії HOMO та LUMO, придатними для виявлення нітроароматичних вибухових сполук. Дослідження фотофізичних властивостей синтезованих сполук за допомогою UV-VIS-спектрофотометрії, стаціонарної та часороздільної люмінесцентної спектроскопії, включаючи властивості SSLE, TADF, RTP, при різних температурах.

Початок етапу: 05.2024

Закінчення етапу: 12.2014

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, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333, 380442393230

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: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 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): 2201380

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 196.246
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Застосування органічних довготривало-випромінюючих емітерів, здатних до твердотільного підсилення люмінесценції для детектування нітроароматичних вибухових речовин

Назва роботи англійською:

Application of long-lived organic emitters capable of solid-state luminescence enhancement for the detection of nitroaromatic explosives

Реферат українською:

Широке використання вибухівки військовими стало однією з головних проблем безпеки після 24 лютого 2022 року, коли Росія почала неспровоковане вторгнення в Україну. Серед вибухових речовин нітроароматичні є відносно простими у використанні, дешевими та широко розповсюдженими. Зростання використання вибухових матеріалів викликало нагальну потребу в методах виявлення вибухових речовин і спричиненого ними забруднення навколишнього середовища. Методи виявлення повинні бути простими, недорогими, чутливими та непомітними. Метою даного проєкту є дизайн, синтез та дослідження фотофізичних, електрохімічних та теплових властивостей нових органічних донорно-акцепторних випромінювачів, що можуть проявляти твердотільне підсилення люмінесценції (SSLE), термоактивовану затриману флюоресценцію (TADF) і фосфоресценцію при кімнатній температурі (RTP) для оптичного детектування нітроароматичних вибухових речовин. Основні завдання проєкту: 1) Проектування та теоретичний аналіз структур емітера донорно-акцепторного типу, потенційно проявляючого як SSLE, так і довгоживуче випромінювання. 2) Синтез та ідентифікація новостворених найбільш перспективних емітерів, що містять феноксазин, фенотіазин, диметилакридин та ін. як електронодонорні фрагменти та 1,4-біс(трифторметил)бензол, 2,3-дифенілпіразин та ін. як акцепторні. 3) Дослідження термічних, електрохімічних, фотофізичних властивостей синтезованих органічних випромінювачів та порівняння їх з аналогічними відомими випромінювачами, які використовуються в сенсорах нітроароматичних вибухових речовин. 4) Оцінка придатності сполук для детектування нітроароматичних складних вибухових речовин та створення сенсора. Основна ідея полягає в створенні сенсору вибухових речовин, прототипом якого буде двокомпонентна система: матрична сполука-домішка, де як матриця буде використана нова розроблена і синтезована сполука, яка проявляє термічну активовану затриману флюоресценцію.

Реферат англійською:

The widespread use of explosives by the military has become one of the main security concerns after February 24, 2022, when Russia launched an unprovoked invasion of Ukraine. Among explosives, nitroaromatics are relatively easy to use, cheap, and widespread. The increasing use of explosives has created an urgent need for methods for detecting explosives and the environmental pollution they cause. Detection methods must be simple, inexpensive, sensitive, and unobtrusive. The goal of this project is to design, synthesize, and investigate the photophysical, electrochemical, and thermal properties of novel organic donor-acceptor emitters that can exhibit solid-state enhanced luminescence (SSLE), thermally activated delayed fluorescence (TADF), and room temperature phosphorescence (RTP) for optical detection of nitroaromatic explosives. The main objectives of the project: 1) Design and theoretical analysis of donor-acceptor type emitter structures, potentially exhibiting both SSLE and long-lived radiation. 2) Synthesis and identification of newly created most promising emitters containing phenoxazine, phenothiazine, dimethylacridine, etc. as electron-donor fragments and 1,4-bis(trifluoromethyl)benzene, 2,3-diphenylpyrazine, etc. as acceptors. 3) Study of thermal, electrochemical, photophysical properties of synthesized organic emitters and comparison with similar known emitters used in nitroaromatic explosives sensors. 4) Assessment of the suitability of compounds for detecting nitroaromatic complex explosives and creation of a sensor. The main idea is to create an explosives sensor, the prototype of

which will be a two-component system: a matrix compound-impurity, where a newly developed and synthesized compound that exhibits thermally activated delayed fluorescence will be used as the matrix.

Індекс УДК: 535.37

Коди тематичних рубрик: 29.31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Навоженко Олександр Миколайович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові випромінювачі, що потенційно можуть проявляти термоактивовану затриману флюоресценцію

Назва НТП англійською: New emitters that can potentially exhibit thermally activated delayed fluorescence

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено нові випромінювачі, що потенційно можуть проявляти термоактивовану затриману флюоресценцію (TADF). З неполярних розчинників ми спробували використати толуол, діоксан. В результаті як неполярний розчинник було обрано гексан, оскільки в толуолі і діоксані є значне поглинання в УФ області, і в спектрах люмінесценції відповідно фіксується випромінювання розчинника. Як полярний розчинник було використано ацетонітрил. Для двох сполук спектри флюоресценції в полярному (ацетонітрил) і неполярному (гексан) розчинниках відрізнялися за положенням максимумів приблизно на 40 нм, що свідчить про сольватохромізм. Було зареєстровано високий квантовий вихід люмінесценції сполуки 2 при кімнатній температура-турі. При зростанні температури від 77K інтенсивність затриманого випромінювання даної сполуки в гексані значно зростала. Були зареєстровані спектри та криві загасання випромінювання даної сполуки при температурах 77K, 95K, 110K, 130K в рідких розчинах гексана. Було показано, що при нагріванні вклад довгої компоненти зростає, що свідчить про те, що дана сполука проявляє термоактивовану затриману флюоресценцію. Для практичного застосування даної сполуки для детекції нітроароматичних вибухових речовин було створено композитні плівки, де як матриця була використана нова сполука 2 з домішкою, що може потенційно перехоплювати збудження від матричних молекул. Проте спектри поглинання такої плівки відрізняються від спектру поглинання речовини 2 в рідких розчинах гексана чи ацетонітрилу. Ця відмінність може свідчити про утворення агрегатів в плівці. Така система може бути прототипом сенсора вибухових речовин за умови передачі збудження від агрегатів до молекул вибухової речовини.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Для потреб оборони, безпеки, економіки та/або суспільства України

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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

Публікації - 1; презентація та дисемінація результатів - 2

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна

д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Доценко Михайло Андрійович

Лосицький Михайло Юрійович

(к. ф.-м. н., 01.04.05)

Федотов Олесь Юрійович

**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**

