Реєстраційна картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0126U001265

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2026

II. Підстава для проведення робіт

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрям фінансування: 2.1 - Фундаментальні дослідження ()

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

У тому числі по роках:	
2026	7563.311 тис. грн.
2027	7563.000 тис. грн.
2028	7563.000 тис. грн.
2029	7563.000 тис. грн.
2030	7563.000 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 37815.311 тис. грн.	

III. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01601, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

IV. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Олега Мудрака, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: 01298dc11

Розмір організації:

Телефон: 380444243567

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделювання методами квантової хімії, молекулярної динаміки, квантової механіки та статистики процесів (адсорбція, модифікування, утворення наночастинок, окисно-відновні реакції, формування поверхневих електронних станів, масоперенесення, трансфер енергії) за участі поверхні твердого тіла, які відбуваються в кремнієвих, вуглецевих та оксидних наносистемах при дії зовнішніх полів (теплового, електромагнітного тощо).

Назва роботи англійською:

Simulation using quantum chemistry, molecular dynamics, quantum mechanics, and process statistics (adsorption, modification, nanoparticle formation, redox reactions, surface electron state formation, mass transfer, energy transfer) involving solid surfaces, which occur in silicon, carbon, and oxide nanosystems under the influence of external fields (thermal, electromagnetic, etc.).

Мета роботи українською:

Мета роботи полягає в обґрунтуванні методами сучасного моделювання переваги концепції об'ємного гетеропереходу в робочому матеріалі сонячних елементах (СЕ) перед пласким гетеропереходом в чисто органічних та гібридних СЕ; у визначені оптимальних значень теплових, оптичних і електричних параметрів СЕ з кремнієвими нанонитками і металевими наночастинками; в з'ясуванні впливу інтерфейсів між квантовою точкою та матрицею на фізичні властивості наносистем (в наближенні атомоподібних штучних атомів та штучних квазімолекул) під дією слабких зовнішніх полів; у визначенні особливостей трансферу енергії у вуглецевих наносистемах зниженої розмірності (леговані графен, вуглецеві нанотрубки, нанодроти тощо); у розробці моделей функціонування нанорозмірних ретчет-систем, що створюють направлені потоки наночастинок біля поверхні твердого тіла; у побудові моделей вуглецевих нанотрубок (ВНТ) різної хіральності, довжини, діаметра, кількості стінок та визначення на основі отриманих результатів серії квантово-хімічних розрахунків оптимальних їх структур; у встановленні механізмів окисно-відновних реакцій за участі вуглецевих наноматеріалів і з'ясування впливу на них структурних дефектів або атомів допантів, розчинника, а також pH середовища; у пошуку зв'язків між просторовою і електронною будовою наночастинок нових неорганічних пігментів та їхнім забарвленням на основі аналізу результатів квантовохімічного дослідження; у встановленні залежності впливу структурних дефектів поверхні наночастинок діоксидів на їхні сенсорні властивості; у розробці теоретичних методів та їх

експериментальної реалізації при отриманні поверхні кварцу з заданими нанометровими параметрами шорсткості; у подальшій розробці теорії імпедансної спектроскопії для аналізу дифузійно-контрольованої адсорбції нейтральних молекул на шорсткій поверхні електрода з тонким адсорбційним шаром.

Мета роботи англійською:

The aim of the work is to substantiate, using modern modelling methods, the advantages of the concept of a volumetric heterojunction in the working material of solar cells (SC) over a flat heterojunction in purely organic and hybrid SC; to determine the optimal values of thermal, optical and electrical parameters of SE with silicon nanowires and metal nanoparticles; to clarify the influence of interfaces between quantum dots and matrices on the physical properties of nanosystems (in the approximation of atom-like artificial atoms and artificial quasi-molecules) under the action of weak external fields; in determining the characteristics of energy transfer in reduced-dimensionality carbon nanosystems (doped graphene, carbon nanotubes, nanowires, etc.); in developing models of the functioning of nanoscale ratchet systems that create directed flows of nanoparticles near the surface of a solid body; in constructing models of carbon nanotubes (CNTs) of different chirality, length, diameter, number of walls, and determining their optimal structures based on the results of a series of quantum chemical calculations; in establishing the mechanisms of redox reactions involving carbon nanomaterials and clarifying the influence of structural defects or dopant atoms, solvent, and pH of the environment on them; searching for connections between the spatial and electronic structure of nanoparticles of new inorganic pigments and their colouring based on the analysis of the results of quantum chemical research; establishing the dependence of the influence of structural defects of the surface of dioxide nanoparticles on their sensory properties; developing theoretical methods and their experimental implementation in obtaining a quartz surface with specified nanometre roughness parameters; further developing the theory of impedance spectroscopy for analysing diffusion-controlled adsorption of neutral molecules on a rough electrode surface with a thin adsorption layer.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: Фундаментальні наукові дослідження

Очікувані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: Хімія, фізика

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лобанов Віктор Васильович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3557-1033

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Обґрунтування методами сучасного моделювання переваги концепції об'ємного гетеропереходу в робочому матеріалі СЕ перед пласким гетеропереходом. Дослідження теплових, оптичних і електричних параметрів СЕ з кремнієвими нанонитками і металевими наночастинками. Визначення особливостей трансферу енергії у вуглецевих наносистемах зниженої розмірності.

Початок етапу: 01.2026

Закінчення етапу: 12.2026

Вид звітного документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 2

Назва етапу: Визначення особливостей трансферу енергії у вуглецевих наносистемах зниженої розмірності (легований графен, вуглецеві нанотрубки, нанодроти тощо). Розробка моделей функціонування нанорозмірних ретчет-систем, що створюють направлені потоки наночастинок за відсутності стаціонарних зовнішніх впливів. Побудова моделей ВНТ різної хіральності, довжини, діаметра, кількості стінок та визначення на основі результатів серії квантово-хімічних розрахунків оптимальних їх структур.

Початок етапу: 01.2027

Закінчення етапу: 12.2027

Вид звітного документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 3

Назва етапу: Встановлення механізмів окисно-відновних реакцій за участі вуглецевих наноматеріалів і залежність від структурних дефектів. Пошук зв’язку між просторовою і електронною будовою наночастинок нових неорганічних пігментів та їхнім забарвленням. З’ясування залежності впливу структурних дефектів поверхні наночастинок діоксидів стануму та титану на їхні сенсорні властивості.

Початок етапу: 01.2028

Закінчення етапу: 12.2028

Вид звітного документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 4

Назва етапу: Визначення особливостей оптимальної ієрархічної архітектури органічних СЕ. Розробка теоретичних методів та їх експериментальна реалізація при поліруванні поверхні кварцу з заданими нанометровими параметрами шорсткості. Подальша розробка теорії імпедансної спектроскопії для аналізу дифузійно-контрольованої адсорбції нейтральних молекул на шорсткій поверхні з тонким приелектродним шаром.

Початок етапу: 01.2029

Закінчення етапу: 12.2029

Вид звітного документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 5

Назва етапу: Побудова теорії взаємодії електронних поверхневих станів, які виникають на інтерфейсі під дією слабких зовнішніх полів. Визначення оптимальних параметрів моделей ВНТ, які будуть достатніми для задовільного опису їх властивостей з забезпеченням кореляції з експериментально встановленими

результатами. Визначення засад конструювання нових, перспективних і дешевих у виробництві хімічних сенсорів, таких як селективні та специфічні газоаналізатори, з використанням окисно-відновних реакцій вуглець-вмісних систем

Початок етапу: 01.2030

Закінчення етапу: 12.2030

Вид звітного документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 544 , 544

Коди тематичних рубрик: 31.15

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Туров Володимир Всеволодович
д. х. н., професор, чл-кор.НАН України, 01.04.18

Відповідальний за підготовку облікових документів Гаврилюк Олександр Олександрович

Телефон +380967234213

Реєстратор Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Тетяна Анатоліївна