Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0219U101596

Державний реєстраційний номер: 0119U101739

Відкрита

Дата реєстрації: 23-09-2019

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Молекулярний дизайн та синтез нових барвників для DSSC

Початок етапу: 05-2019

Закінчення етапу: 08-2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071205

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Телефон: 0577051247

E-mail: univer@karazin.ua

E-mail: rector@karazin.ua

WWW: http://www.univer.kharkov.ua/

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071205

Адреса: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380577051247

E-mail: univer@karazin.ua

E-mail: rector@karazin.ua

WWW: http://www.univer.kharkov.ua/

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 220 1020

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 120 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Високоефективні фотоелектричні сонячні елементи на основі нових барвників-сенсибілізаторів. Молекулярний дизайн та оптимізація фотоіндукованих процесів

Назва роботи (англ)

High-performance photovoltaic solar cells based on new dye-sensitizers. Molecular design and optimization of photoinduced process

Реферат (укр)

Обпєкт дослідження – теоретичні та експериментальні методи дослідження та дизайну органічних сполук придатних до використання в сонячних елементах; вплив структурних характеристик органічних сполук на спектральні властивості. Мета роботи – оптимізація складу системи: «широкозонний оксидний напівпровідник – барвник-сенсибілізатор – іонна рідина / молекулярний розчинник» з метою підвищення коефіцієнту корисної дії сенсибілізованих барвником сонячних елементів та покращання їх експлуатаційних характеристик шляхом синтезу нових барвників та прогнозу їх електронно-спектральних характерстик. Методи дослідження – органічний синтез; спектроскопія поглинання; квантово-хімічні обчислення, термогравіметричний метод (ТГА). Розроблено та програмно реалізовано методику віртуального скринінгу π-спряжених систем з метою виявлення молекул барвників із заданою електронною будовою (зокрема – оптичними властивостями). Для сгенерованої бібліотеки молекул, яка включає більш чотирьох тисяч систем, спершу було проведено розрахунки спектру за допомогою напівемпіричних методів квантової хімії. Подальший розрахунок найбільш перспективних систем з використанням методів ab initio дозволив запропонувати ряд барвників, що мають інтенсивне поглинання у довгохвильовій частині спектру. З використанням квантово-хімічних розрахунків виконано аналіз електронної будови кон'югантів кумаринових барвників з наночастинкою TiO2, що дало можливість оцінити ефективності фотосенсибілізованого переносу електрона. Проведена оптимізація рециклізаційної методики синтезу 3-(оксадізоліл)кумаринів. На модельних сполуках методом ТГА вивчено залежність температури рециклізації від будови вихідних 2-N-гідразоноімінокумаринів та з використанням цих даних синтезовано ряд нових барвників. З використанням реакції Сузукі проведено введення арильних та геатарильних фрагментів до молекули, що дало можливість подовжити супряження π-системи та досягти батофлорного ефекту.

Реферат (англ)

Object of study - theoretical and experimental methods of research and design of organic compounds suitable for use in the solar cells; influence of structural characteristics on spectral properties of organic compounds. The purpose of the work is to optimize the composition of the system: "wide-band oxide semiconductor - dye-sensitizer - ionic liquid / molecular solvent" in order to increase the efficiency of dye-sensitized solar cells and improve their performance characteristics by synthesis of new dyes and prediction of their electron-spectral properties. Research methods - organic synthesis; absorption spectroscopy; quantum-chemical calculations, thermogravimetric method (TGA). The technique of virtual screening of π-coupled systems was developed and implemented to identify dye molecules with a given electron structure (in particular, optical properties). For the generated library of molecules, which includes more than four thousand systems, the first step was to calculate the spectrum using semi-empirical methods of quantum chemistry. Further calculation of the most promising systems using the ab initio methods allowed us to propose a number of dyes having intense absorption in the long-wavelength part of the spectrum. Using the quantum chemical calculations, the electronic structure of coumarin-like dyes conjugated with TiO2 nanoparticles was analyzed, which made it possible to evaluate the efficiency of photosensitized electron transfer. Optimization of recycling methods for synthesis of 3-(oxadizolyl) coumarins was carried out. The dependence of the recycling temperature on the structure of the original 2-N-hydrazonoiminocoumarins was studied on the model compounds using the TGA method and a

number of new dyes were synthesized using these data. Using the Suzuki reaction, aryl and gearyl fragments were introduced into the molecule, which made it possible to prolong the conjugation of the π-system and to achieve a bathflora effect.

Індекс УДК: 544.52, 544.52 + 541.136

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15.29.05

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Молекулярний дизайн та синтез нових барвників для DSSC.

Назва продукції (англ): Molecular design and synthesis of new dyes for DSSC.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Альтернативна енергетика

Опис продукції (укр): Розроблено теоретичні підходи та алгоритмі, за допомогою яких було створено віртуальну бібліотеку органічних сполук – барвників які потенційно можуть бути використані у створенні сонячних комірок. Проведено детальне дослідження можливостей сучасних квантовохімічних методів, які дозволять адекватно описати геометричну та електронну будову, а також оптичні характеристики, перспективних π-спряжених сполук. Реалізовано нові алгоритми віртуального скринінгу, які базуються на прогресивній послідовності наближень квантової хімії починаючи з напівемпіричних π-електронних розрахунків і закінчуючи неемпіричними оцінками спектральних властивостей. Використання вказаних алгоритмів для віртуальної бібліотеки що включає до чотирьох тисяч молекулярних структур-барвників дозволило виділити певну множину перспективних молекул. Також, за допомогою процедури віртуального скринінгу запропоновано ряд нових (ще не синтезованих) барвників які мають реалізувати унікальні оптичні характеристики (довжина хвилі поглинання, інтенсивність поглинання).

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія матеріалів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП:

Строки впровадження: 05.201908.2019

Виробник продукції: ХНУ імені В.Н.Каразіна

Споживачі продукції: НТУ України Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського;, НТУ «ХПІ»

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 35

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Коваленко Сергій Миколайович (д. х. н., професор)

Колесник Ярослав Валентинович (доц.)

Керівник організації:

Катрич Віктор Олександрович (д. ф.-м. н., професор)

Керівники роботи:

Калугін Олег Миколайович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.