Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U004234

Державний реєстраційний номер: 0124U003833

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-11-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Оптимізація та виготовлення функціональних шарів низькорозмірної гетероструктури.

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322582111

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, 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)

Напрям фінансування: 2.7 - інше

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2574.858

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Низькорозмірні структури для підсилення квантового виходу люмінесценції у високоефективних фосфоресцентних світловипромінюючих пристроях

Назва роботи англійською:

Low-dimensional structures for enhancing the luminescence quantum yield in highly efficient phosphorescent light-emitting devices

Реферат українською:

Авторами проєкту за звітний період розроблено алгоритм та чисельну реалізацію розрахунку багатошарових квантових структур OLED шляхом розв'язку стаціонарного рівняння Шредингера в імпульсному представленні. Розроблене відповідне програмне забезпечення. Встановлено, що збільшення показника заломлення матриці органічного напівпровідника призводить до збільшення амплітуди перерізу розсіювання, однак не впливатиме на форму спектра. Визначено чутливість оптичного відгуку наночастинок Au до змін показника заломлення транспортних шарів. Розраховані спектри поглинання та люмінесценції молекул триптофану, гліцину, цистеїну та метіоніну з урахуванням спін-орбітальної взаємодії методом TD DFT і вперше показано важливу роль низьких триплетних T1 станів цих молекул. З метою синтезу нових похідних хіноліну для OLED технології, було удосконалено механізм реакції Скраупа-Дебнера-Міллера для отримання хіноліну та його похідних із похідних піридину та акролеїну. Розраховано декілька моделей зіткнення молекул, їх теплоти утворення, частоти коливань ядер, зміни зарядів на атомах та поляризації. Розширено знання про вплив ширини квантових ям та ширини бар'єрів на дискретні рівні енергії та локалізацію хвильових функцій в системі квантових ям багатошарових світловипромінюючих структур на основі органічних напівпровідників.

Реферат англійською:

During the reporting period, the authors of the project developed an algorithm and numerical implementation for calculating multilayer quantum OLED structures by solving the stationary Schrödinger equation in impulse representation. The corresponding software was developed. It was established that an increase in the refractive index of the organic semiconductor matrix leads to an increase in the scattering cross section amplitude, but does not affect the shape of the spectrum. The sensitivity of the optical response of Au nanoparticles to changes in the refractive index of transport layers was determined. The absorption and luminescence spectra of tryptophan, glycine, cysteine and methionine molecules were calculated taking into account spin-orbital interaction using the TD DFT method, and the important role of the low triplet T1 states of these molecules was demonstrated for the first time. With the aim of synthesising new quinoline derivatives for OLED technology, the Scraup-Debner-Miller reaction mechanism was improved to obtain quinoline and its derivatives from pyridine and acrolein derivatives. Several models of molecule collisions, their heat of formation, nuclear vibration frequencies, charge changes on atoms, and polarisation were calculated. Knowledge about the influence of quantum well width and barrier width on discrete energy levels and wave function localisation in the quantum well system of multilayer light-emitting structures based on organic semiconductors has been expanded.

Індекс УДК: 621.38.049.77; 621.375.82.01

Коди тематичних рубрик: 47.03.13

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Стахіра Павло Йосипович

Науковий ступінь: д. т. н.

Вчене звання:професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Чисельний метод пошуку дискретних рівнів енергії та відповідних хвильових функцій.

Назва НТП англійською: Numerical method for searching for discrete energy levels and corresponding wave functions.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: 72.19 Дослідження та експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблений чисельний метод пошуку дискретних рівнів енергії та відповідних хвильових функцій, що ґрунтується на розв'язку стаціонарного рівняння Шредингера в імпульсному представленні, забезпечує високу точність аналізу. Цей метод може суттєво спростити налаштування архітектури оптоелектронних приладів, що мають у своєму складі нанорозмірні органічні та гетероструктури і принцип дії яких ґрунтується на квантових ефектах. Знаючи енергетичні рівні електронів та дірок в квантових ямах, можна керувати спектром випромінювання світловипромінюючих структур органічної електроніки. Дискретні рівні енергії в основному визначаються шириною квантових ям. Як наслідок, вибираючи систему квантових різної ширини, можна забезпечити випромінювання білого світла, або забезпечити фоточутливість таких структур в широкому спектральному діапазоні. Встановлені умови числового процесу, які визначають необхідну точність аналізу.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Інше (Удосконалення існуючих методів та технологій)

Вплив НТП на довкілля: Не впливає

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки: України

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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Демидов Іван Васильович
д. т. н., 05.12.02

Перелік осіб-виконавців

Булавінець Тетяна Олександрівна
(д.філософ, доц.)

Дева Лілія Ростиславівна
(д.філософ)

Кузик Наталія Ігорівна

Мінаєва Валентина Олександрівна
(к. х. н.)

Фітьо Володимир Михайлович
(д. ф.-м. н., професор, 01.04.05)

Яремчук Ірина Ярославівна
(д. т. н., професор)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Рибалкіна Ірина Борисівна

Телефон

(032)258 27 46

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна