Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U032931

Державний реєстраційний номер: 0124U003833

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання та створення світловипромі-нювачів на основі низькорозмірних структур.

Початок етапу: 08.2024

Закінчення етапу: 12.2024

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.): 894.824

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 отримані моделі для розрахунку елементів матриці спін-орбітального зв'язку для складних металевих та елементо-органічних напівпровідників в рамках методу само-узгодженого поля у повному активному просторі конфігураційної взаємодії. Проведено моделювання та оптимізацію оптичних характеристик плазмонних наночастинок срібла різного розміру та геометричної форми. Встановлено, що зміна розміру наночастинок призводить до перерозподілу електричного поля по поверхні, а максимальне його напруження припадає на гострі вершини частинок. Проведено дослідження композиційного матеріалу, що містить випадково диспергований ансамбль еліпсоїдних наночастинок однакової та різної форми та розмірів в органічній напівпровідниковій матриці. Показано, що зміна показника заломлення органічної напівпровідникової матриці в основному впливає на величину перерізу розсіювання ансамблю диспергованих у ній еліпсоїдних наночастинок. Проведено моделювання характеристики транспортування електричних носіїв в експериментально сформованому OLED в архітектурі якого наявні квантові ямами. Досліджено вплив ширини ями, кількості квантових ям на розподіл носіїв в них. Одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера використано для розрахунку дискретних рівнів електронів і дірок у квантових ямах. Спостерігається сильна локалізація дискретних електронних та діркових рівнів у квантових ямах, що відповідає значному збільшенню модуля хвильових функцій усередині цих ям. Встановлено, що для збільшення енергії дискретних рівнів необхідно формувати ширину квантових ям менше 5 нм, та підбирати емітерний органічний напівпровідник з низьким значенням ефективної маси носіїв заряду. Створенні методом вакуумного осадження OLED з використанням структури MQW не виявили зниження квантової ефективності при високих робочих напругах, що є характерною проблемою для традиційних OLED зокрема, що використовують архітектуру гість-господар.

Реферат англійською:

During the reporting period, obtained models for the calculation of the elements of the spin-orbital coupling matrix for complex metallic and elementary organic semiconductors. It was within the framework of the self-consistent field method in the full active space of configurational interaction. Modeling of the optical properties of plasmonic silver nanoparticles of different sizes and geometric shapes has been carried out. It was found that a change in the nanoparticles size leads to a redistribution of the electric field on the surface. Its maximum electric field voltage falls on the sharp tops of the particles. A study was made of a composite material containing a randomly dispersed ensemble of ellipsoidal nanoparticles of different shapes and sizes in an organic semiconductor matrix. It is shown that the change in the refractive index of the organic semiconductor matrix mainly affects only the size of the scattering cross section of the ensemble of ellipsoidal nanoparticles dispersed in it. The modeling of the transport properties of electric carriers in an experimentally fabricated OLED with quantum wells in its architecture was performed. The influence of the well width, the number of quantum wells on the distribution of carriers in them was studied. The one-dimensional stationary Schrödinger equation has been used to calculate the discrete levels of electrons and holes in quantum wells. A strong localization of discrete electron and hole levels in quantum wells is observed, which corresponds to a significant increase of the modulus of wave functions inside these wells. It was found that in order to increase the energy of discrete levels, it is

necessary to form quantum wells with a width 5 nm. The fabrication of OLEDs with the MQW structure using the vacuum deposition method did not show a decrease in quantum efficiency at high operating voltages, which is a characteristic problem of traditional OLEDs.

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: Модель SCF у повному активному просторі для розрахунку елементів матриці спін-орбітального зв'язку для складного AgNP-органічного напівпровідника. Технологічний метод нанесення шарів нанорозмірних органічних плівок з притаманним їм ефектом фосфоресцентного випромінювання при кімнатній температурі.

Назва НТП англійською: SCF model in full active space for calculating the elements of the spin-orbit coupling matrix for a complex AgNP-organic semiconductor. Technology for depositing layers of nanoscale organic films with their inherent phosphorescent emission effect at room temperature.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технологічний метод осадження нанорозмірних функціональних органічних плівок.

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Модель SCF у повному активному просторі для розрахунку елементів матриці спін-орбітального зв'язку для складного AgNP-органічного напівпровідника полягає у побудові алгоритму розрахунку дозволених синглетних та триплетних станів і спін-орбітальної взаємодії в неметалічних світловипромінюючих органічних молекулах з притаманним їм фосфоресцентним механізмом. Технологічний метод нанесення шарів нанорозмірних органічних плівок з притаманним їм ефектом фосфоресцентного випромінювання при кімнатній температурі полягає у застосуванні запропонованого приладу прецезійного вимірювання швидкості нанесення та товщин нанорозмірних плівок в процесі осадження при кімнатній температурі.

Соціально-економічна спрямованість НТП: удосконалення існуючих методів та технологій

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Результати роботи використані у навчальному процесі

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НВП «ЕЛЕКТРОН-КАРАТ»

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)

Дева Лілія Ростиславівна

Кузик Наталія Ігорівна

Лаврів Назар Андрійович

Мінаєва Валентина Олександрівна
(к. х. н.)

Стецина Артем Андрійович

Фітьо Володимир Михайлович
(д. ф.-м. н.)

Яремчук Ірина Ярославівна
(д. т. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Рибалкіна І.Б.

Телефон +38 (032) 258-27-46

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

