Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Image not found or type unknow

Державний обліковий номер: 0824U000192

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Інституту хімії поверхні ім. О.О. Чукйка НАН України від 25.03.2024 №15

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Білюк Анатолій Анатолійович
2. Anatoliy Bilyuk

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: фізика поверхні, фізика нанорозмірних твердих тіл

Дата захисту: 20-02-2024

Спеціальність за освітою: 014 Середня освіта (фізика)

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 26.210.4404

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.31.27, 29.33.47, 29.19.21

Тема дисертації:

1. Особливості поглинання електромагнітного випромінювання наночастинками металів в умовах локалізованого поверхневого плазмонного резонансу

2. Peculiarities of absorption of electromagnetic radiation by nanoparticles of metals under conditions of plasmon resonance

Реферат/анотація:

1. Метою роботи є дослідження взаємодії металевих наночастинок з електромагнітним випромінюванням в умовах плазмонного резонансу з можливістю їх подальшого використання в пристроях органічної електроніки, зокрема в сонячних елементах. Актуальність роботи обумовлена тим, що в останні роки шукається спосіб отримання дешевої та доступної електроенергії. Основним аспектом якої також є екологічність елементів з якої вона добувається. Перспективним напрямком для досліджень та отримання такої енергії є сонячні елементи з органічними напівпровідниками. Адже такі сонячні елементи можуть бути, ефективними в перетворюванні енергії, гнучкими, екологічними, та доступними. Головним напрямком таких досліджень є сонячні елементи на онові органічних напівпровідників з інкорпорованими частинками металу,

а також процеси що відбуваються в середовищі напівпровідника та на поверхні частинок. У роботі використовуються: математичний апарат та методи класичної електродинаміки в електростатичному наближенні, метод кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації, метод скінченних різниць в часовій області. В дисертаційній роботі, під час проведення досліджень, було отримано низку нових та важливих теоретичних результатів: 1. Спираючись на метод кінетичного рівняння, розраховано оптичну провідність металевих наночастинок сфероїдальної форми та залежність ширини лінії локалізованого плазмонного резонансу (ЛППР), від діелектричної провідності оточуючого середовища для сферичних наночатинок Ag. Показано, що із зростанням радіусу сферичної наночастинки ширина лінії ЛППР суттєво зменшується і осцилює навколо певного розміру частинок. 2. Проведене, методом скінченної різниці в часовій області (FDTD), чисельне моделювання оптичних характеристик органічних сонячних елементів (ОСЕ) на основі полі-3,4-етилендиоксітіофен:полістерол сульфонат з інкорпорованими наночастинками металів показало, що їх додавання в фоточутливий шар значно збільшує коефіцієнт поглинання світла коміркою при більших довжинах хвиль (від 600 нм). Наявність піків поглинання для Cu близько 829 нм, Au близько 625 нм, та Ag близько 726 нм вказує на наявність локалізованого повеневого плазмонного резонансу. 3. Показано, що додавання металевих наночастинок (МНЧ) до світлочутливого шару органічного сонячного елементу (ОСЕ) посилює поглинання ними світла, і це залежить від форми та матеріалу МНЧ. 4. Показано, що в металевих наночастинках, розміри яких менші за довжину вільного пробігу електрона в металевій наночастинці, оптична провідність і, відповідно, коефіцієнт поглинання світла стають тензорними величинами. Окрім того коефіцієнт поглинання світла (лазерного випромінювання) металевими наночастинками в умовах плазмонного резонансу, залежить від їх форми (через геометричні фактори), діелектричної проникності оточуючого середовища та тензора оптичної провідності металевої наночастинки. 5. Розрахунки методом FDTD показують що, ЛППР, індукований наночастинками, не тільки підвищує ступінь поглинання світла, але й збільшує ступінь дисоціації екситонів, що виникають в фоточутливому шарі органічних напівпровідників під дією електромагнітного випромінювання. Продемонстровано, що при витягнутій формі частинок (міді, срібла, золота), коефіцієнт поглинання зменшується, в той час як, при дослідження круглих частинок або сплюснутих збільшується, притому можна розглядати приплюснуті частинки як кластери скупчень частинок. Одержані в роботі результати можуть бути використані при створенні нових функціональних матеріалів з наперед заданими властивостями для твердотільної мікроелектроніки, технології напівпровідникового виробництва, конструювання органічних сонячних елементів. Зокрема, інкорпорування металевих наночастинок в фоточутливий шар на основі полімеру ПЕДОТ:ПСС дозволить помітно збільшити коефіцієнт корисної дії таких органічних сонячних елементів. Ключові слова: металеві наночастинки, поглинання, електромагнітне випромінювання, локалізований поверхневий плазмонний резонанс, електрони, плазмони, кінетичне рівняння, випромінювання

2. The purpose of the work is to study the interaction of metal nanoparticles with electromagnetic radiation under conditions of plasmon resonance with the possibility of their further use in organic electronic devices, in particular in solar cells. The relevance of the work is due to the fact that in recent years, a method of obtaining cheap and affordable electricity has been sought. The main aspect of which is also the environmental friendliness of the elements from which it is obtained. Solar cells with organic semiconductors are a promising direction for research and obtaining such energy. After all, such solar cells can be efficient in converting energy, flexible, ecological, and affordable. The main focus of such research is solar cells based on organic semiconductors with incorporated metal particles, as well as processes occurring in the semiconductor medium and on the surface of the particles. The work uses: the mathematical apparatus and methods of classical electrodynamics in the electrostatic approximation, the Boltzmann kinetic equation method in the relaxation time approximation, the finite difference method in the time domain. In the dissertation work, during the research, a number of new and important theoretical results were obtained: 1. Based on the kinetic equation method, the optical conductivity of spheroidal metal nanoparticles and the dependence of the localized plasmon resonance (LPR) line width on the dielectric conductivity of the surrounding medium for spherical Ag nanowires were calculated. It is shown that as the radius

of a spherical nanoparticle increases, the width of the LPPR line significantly decreases and oscillates around a certain particle size. 2. Numerical modeling of the optical characteristics of organic solar cells (OSE) based on poly-3,4-ethylenedioxythiophene:polysterol sulfonate with incorporated metal nanoparticles showed that their addition to the photosensitive layer significantly increases the coefficient of light absorption by the cell at longer wavelengths (from 600 nm). The presence of absorption peaks for Cu around 829 nm, Au around 625 nm, and Ag around 726 nm indicates the presence of localized flood plasmon resonance. 3. It has been shown that the addition of metal nanoparticles (MNPs) to the photosensitive layer of an organic solar cell (OSE) increases their absorption of light, and this depends on the shape and material of the MNPs. 4. It is shown that in metal nanoparticles, the dimensions of which are smaller than the length of the free path of the electron in the metal nanoparticle, the optical conductivity and, accordingly, the light absorption coefficient become tensor quantities. In addition, the coefficient of absorption of light (laser radiation) by metal nanoparticles under plasmon resonance conditions depends on their shape (due to geometric factors), the dielectric constant of the surrounding medium, and the optical conductivity tensor of the metal nanoparticle. 5. Calculations using the FDTD method show that nanoparticle-induced LPR not only increases the degree of light absorption, but also increases the degree of dissociation of excitons arising in the photosensitive layer of organic semiconductors under the action of electromagnetic radiation. It has been demonstrated that with the elongated shape of particles (copper, silver, gold), the absorption coefficient decreases, while when studying round or flattened particles, it increases, and flattened particles can be considered as clusters of particle clusters. The results obtained in the work can be used in the creation of new functional materials with predefined properties for solid-state microelectronics, semiconductor production technology, and the construction of organic solar cells. In particular, the incorporation of metal nanoparticles into the photosensitive layer based on the PEDOT:PSS polymer will significantly increase the efficiency of such organic solar cells. Key words: metal nanoparticles, absorption, electromagnetic radiation, localized surface plasmon resonance, electrons, plasmons, kinetic equation, radiation

Державний реєстраційний номер ДіР: 0110U003063, 0113U001895

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: Не застосовується

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Biliuk A.A., Semchuk O.Yu.,. Havryliuk O.O, Biliuk A. I. Modeling of optical characteristics of organic solar cells based on poly (3,4-ethylene dioxythiophene): polystyrene sulfonate with incorporated silver nanoparticles. Surface, 2021, V.13, №27, P. 57-65
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O. Kinetic theory of absorption of ultrashort laser pulses by ensembles of metallic nanoparticles under conditions of surface plasmon resonance. Himia , Fizika and Technology Poverhni. - 2022. - V.13, №2. P.- 190-196
- Semchuk O.Yu., Biliuk A.A., Havryliuk O.O., Biliuk A. I.Kinetic theory of electroconductivity of metal nanoparticles in the condition of surface plasmon resonance. Applied Surface Science Advances, 2021, V.3, P.100057
- Semchuk O.Yu., Biliuk A.A., Havryliuk O.O., The Kinetic Theory of the Width of Surface Plasmon Resonance Line in Metal Nanoparticles. In: Fesenko, O., Yatsenko, L. (eds) Nanooptics and Photonics, Nanochemistry and Nanobiotechnology, and Their Applications. NANO 2020. Springer Proceedings in Physics,V. 264, P.3-10
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu., Havryliuk O.O. Width of the surface plasmon resonance line in spherical metal nanoparticles. Semiconductor Physics , Quantum Electronics & Optoelectronics , 2020. V. 23, №. 3. P. 308-315

- Semchuk O.Yu., Biliuk A.A., Havryliuk O.O. Kinetic theory of surface plasmon resonance in metal nanoparticles. Surface. - 2020 . V. 12. №. 27. – P. 3-19
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O. Physico-chemical properties and application of the conductive organic polymer poly-3,4 ethylenedioxythiophene-polystyrol sulfonal. Surface. – 2019. V. 11. № 26. - P. 414-435
- Semchuk O.Yu,. Havryliuk O.O., Biliuk A.A. Energy absorption of laser radiation by metal nanoparticles in the conditions of surface plasmon resonance. Surface. – 2019. No. 11(26). - P. 496-507.
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O. Influence of surface plasmon resonance on the efficiency of organic solar cells // The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2020). Abstract Book of participants of the International research and practice conference, 26 – 29 August 2020, Lviv. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kyiv: LLC «Computer-publishing, information center», 2020. – P. 552.
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O. Width of surface plasmon resonance in metal nanoparticles / Ukrainian Conference with International participation Chemistry, physics and technology of surface (Kyiv 21-22 Octoder 2020). – p. 31
- Semchuk O.Yu., Biliuk A.A., Havryliuk O.O. The Kinetic Theory of the Width of Surface Plasmon Resonance Line in Metal Nanoparticles. // Selected Proceedings of the 8th International Conference Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2020), 26–29 August 2020, Lviv, Ukraine. // Springer Proceedings in Physics. v/264, p.3-10, 2021.
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O.Kinetic theory of absorption of ultrashort laser pulses by ensembles of metal nanoparticles E-MRS Spring Meeting 2021. Symposium H: “Nanomaterials and advanced characterization. Laser material processing from fundamental interactions to innovative applications” Strasbourg, 2021.
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O.Simulation of optical characteristics of organic solar cells Ukrainian Conference with International participation "Chemistry, physics and technology of surface" (Kyiv, May 26-27, 2021): Book of abstract. - P.32
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O.. Kinetic theory of absorption of ultrashort laser pulses by spheroidal metal nanoparticles in the plasmon resonance region. International research and practice conference: NANOTECHNOLOGIES AND NANOMATERIALS NANO-2021 25 –28 August 2021 Lviv, p.42
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu ., Havryliuk O.O. Kinetic theory of magnetic absorption of laser irradiation by a metallic nanoparticles The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2022). Abstract Book of participants of the International research and practice conference, 25–27 August 2022, Lviv. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2022. – P. 542. (p.457)
- Biliuk A.A., Semchuk O. Yu., Havryliuk O.O . Kinetic theory of laser radiation absorption by metallic nanoparticles (1Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine, Kyiv, 2Centre of New Technologies University of Warsaw, Poland). Proceedings of Ukrainian Conference with International Participation“Chemistry, Physics and Technology of Surface” and Workshop “Microwaves and nanoparticles for real-time detection of human pathogens” – Kyiv, 2022. –206 p.(p.33)
- Biliuk A.A., Havryliuk O.O., Semchuk O. Yu. Simulation of the optical characteristics of organic solar cells with the addition of noble metals of different spherical shapes. The International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO-2023). Abstract Book of participants of the International research and practice conference, 16–19 August 2023, Bukovel. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE, 2023. – P. 640.
- Biliuk A.A., Havryliuk O.O., Semchuk O. Yu. Modeling of optical characteristics of organic solar cells with incorporated Cu and Al metal nanoparticles of different shapes. Book of abstracts of Ukrainian Conference with International Participation “Chemistry, Physics and Technology of Surface” – Kyiv, 2023. – 198 p.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість: економія енергоресурсів; економія матеріалів

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0121U111599

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Семчук Олександр Юрійович

2. Oleksandr Y. Semchuk

Кваліфікація: д.ф.-м.н., с.н.с., 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація: ;https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603561585

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Попович Дмитро Іванович

2. Dmytro I. Popovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4190-225X

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6506631202; Web of Science Researcher ID: F-7083-2017; https://scholar.google.com.ua/citations?user=rGsR-GsAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534430

Місцезнаходження: вул. Наукова, буд. 3-б, Львів, 79060, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Євтух Анатолій Антонович

2. Anatolii Yevtukh

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3527-9585

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 41, Київ, 03028, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобанов Віктор Васильович

2. Viktor Lobanov

Кваліфікація: д.х.н., професор, 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3557-1033

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Покутній Сергій Іванович

2. Sergiy Pokutnii

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4160-1940

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Горбик Петро Петрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Горбик Петро Петрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Дацюк Андрій Михайлович
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна