



ЗАТВЕРДЖУЮ
Директор Інституту фізики
НАН України,
чл.-кор. НАНУ М.В.Бондар
(підпис)
М.П.

АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020-2021 роках в рамках реалізації проекту
із виконання наукових досліджень і розробок
Гнучкі друковані сенсори вологості на основі ліотропних хромонічних рідких кристалів
(назва Проекту)

Назва конкурсу: «Наука для безпеки людини та суспільства»

Реєстраційний номер Проекту: 2020.01/0144

Підстава для реалізації Проекту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проекту) 2020.01/0144 «Гнучкі друковані сенсори вологості на основі ліотропних хромонічних рідких кристалів».

Рішенням наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Наука для безпеки людини та суспільства» (назва конкурсу) протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21.

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Загальна тривалість виконання проекту 2020рік – 2021рік

Тривалість виконання Проекту

Початок – 27.10.2020;

Закінчення – 15.12.2021 року.

Загальна вартість Проекту: 8 654 900.00 грн. вісім мільйонів шістсот п'ятдесят чотири тисячі дев'ятсот грн. 00коп.

Вартість Проекту по роках, грн.:

1-й рік 3 000 000.00 грн. (три мільйони грн. 00 коп.)

2-й рік 5 654 900.00 грн. (п'ять мільйонів шістсот п'ятдесят чотири тисячі дев'ятсот грн. 00коп.)

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проекту буде залучено 10 виконавців, з них:

доктори наук 3;

кандидати наук 4;

інші працівники 3.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Інституту фізики НАН України, <http://www.iop.kiev.ua/ua/>

4. ОПИС ПРОЕКТУ

4.1. Мета Проекту (до 200 знаків)

Збереження структурної цілісності органічних матеріалів при виробництві і експлуатації електронних пристрій на гнучких латерально протяжних підкладках.

4.2. Основні завдання Проекту (до 400 знаків)

1. Встановити основні фізичні властивості плівок ліотропних хромонічних рідких кристалів (ЛХРК), а саме, механізми агрегації, орієнтаційного упорядкування, електричні властивості;
2. Отримати високоупорядковані органічні напівпровідникові ЛХРК-плівки, як універсальну платформу для багатьох сучасних використань;
3. Виготовити гнучкі сенсори вологості шляхом друку тонких плівок ліотропних хромонічних рідких кристалів на гнучких підкладках.

4.3. Детальний зміст Проекту:

Сучасний стан проблеми (до 400 знаків). Сучасні пристрій потребують нових типів сенсорів, створених на нетрадиційних підкладках (гнучких або з можливістю зміни форми) з великою площею. Виготовлення таких сенсорів пов'язане з технологією друку, яка використовує плівку органічного матеріалу як активний шар сенсору. Однак, всі ці підходи потребують достатньо складного приготування чутливих елементів і використання жорсткої підкладки.

Новизна Проекту (до 400 знаків). Реалізація сенсорів вологості на основі органічних супрамолекулярних ансамблів є новим складним підходом, який дозволяє контролювати організацію окремих молекулярних компонент в бажану структуру. Запропонований в проекті метод друку, по суті, являє собою унікальну технологію, яка дозволить створювати структуру органічного напівпровідника на великій площі з літографічним розділенням.

Методологія дослідження (до 400 знаків). Надмолекулярна структурна організація ЛХРК, мікро- і наномасштабне упорядкування об'ємної нематичної фази і тверді плівки будуть досліджені низкою мікрокопічних методів, від оптичного поляризаційного мікроскопа до мікроскопа атомних сил. Буде застосовано метод малокутового рентгенівського розсіяння для структурного аналізу. Буде вивчено механізм переносу носіїв заряду.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проекту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проекту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Встановлено основні закономірності спектральної поведінки хромонічних молекул в полярних та неполярних розчинниках. Визначено умови та пороги (по концентрації) молекулярної агрегації, встановлено структуру агрегатів. Показано результати квантово-хімічних розрахунків, а саме оптимізована рівноважна геометрія молекул досліджуваних речовин в основному та збудженному станах, енергії переходу електронів та сили осциляторів. Проведено числові симуляції молекул методами Монте-Карло і молекулярної динаміки.

Методом рентгенівського дифракційного аналізу встановлено структурні параметри агрегатів, утворених неполярними молекулами в нематичних рідких кристалах. Зокрема, що відстань між молекулами в стеках $d=3.421 \text{ \AA}$, а взаємне зміщення сусідніх молекул $l=1.975 \text{ \AA}$. Методом рентгенівського малокутового розсіяння проведено оцінку розмірів агрегатів молекул на початковій стадії утворення. Найбільш імовірною є модель полідисперсних циліндричних частинок середньою довжиною $L \sim 27 \text{ nm}$ і радіусом $R \sim 0.5 \text{ nm}$. Показано застосування методу низькотемпературної фракційної термічно-стимульованої люмінесценції для визначення функції розподілу густини електронних станів органічних напівпровідників.

Проведено вимірювання оптичної анізотропії Δn і її залежності від температури T , концентрації c , та довжини хвилі λ для орієнтовних зразків водних розчинів ЛХРК та відповідних твердих плівок. Для поглинаючих світло барвників було також виміряно анізотропію поглинання $\Delta k(T, c, \lambda)$. Дані з поглинання були використані для визначення скалярного параметра порядку ЛХРК і його залежності від температури. Використовуючи методи атомно-силової та сканувальної зондової мікроскопії, було визначено розміри, структуру і механічні властивості агрегатів неполярних молекул, вирощених в рідкокристалічних комірках. Побудовано алгоритм конструкування твердих ЛХРК зразків з наперед заданими і контролюваними властивостями та відповідною орієнтацією.

Розроблено технологію 3D-друку хромонічних ліотропних рідких кристалів на основі екструзії для виробництва ієрархічних матеріалів з чітко визначеною анізотропною структурою. Проведено вимірювання двозаломлення твердих плівок ЛХРК нанесених методом 3D-друку з водного розчину для різних концентрацій барвника, різної швидкості нанесення та різної кількості нанесених шарів. Картографування екструдованих ниток під час друку показало, що більша швидкість нанесення призводила до менш анізотропних структур з більш широким розподілом кутів орієнтації директора по поперечному перерізу, тоді як менша швидкість (більші діаметри сопла) призвела до більш анізотропних структур із вищим загальним ступенем орієнтації. Надруковані плівки ЛХРК демонструють однорідну орієнтацію в напрямку екструзії, з кутом орієнтації, близьким до нуля. Визначено параметр порядку та процеси переносу електричного заряду екстрагованих твердих плівок. Параметр порядку в наших експериментах для різної кількості проходів істотно не змінюється. Встановлено залежність провідності твердих плівок ЛХРК, як функції вологи в навколошньому середовищі. Отриманий сенсор вологості на основі хромонічного рідкого кристалу демонструє високу чутливість, яка перевищує 5000% при 30% - 80% відносної вологості, а також час реакції та відновлення в межах 1 с.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

У проекті представлена унікальна ідея з точки зору простоти та гнучкості, чого можна досягти друком сенсорних елементів з водного розчину ЛХРК. Перевагою запропонованого підходу є те, що чутливий елемент може бути надрукований на гнучкій підкладці. Такі сенсорні пристрої пропонують численні технологічні переваги, такі як простота виробництва / інтеграції, а також відповідне зниження витрат.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проекту для економіки та суспільства (стосується проектів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

В рамках реалізації проекту буде представлено новий тип гнучких електронних компонентів з високорозвиненою електронною системою та вдосконаленою структурою (морфологією). Як приклад, передбачається створення гнучких датчиків вологості, що стане першою демонстрацією величезного потенціалу ЛХРК, як сучасних матеріалів для різноманітних гнучких та гібридних електронних пристрій.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проекту в суспільній практиці.

Проект передбачає створення нових електронних пристрій, що демонструють переваги тонких кристалічних органічних плівок. Органічні електронні компоненти є ключовою технологією, що поєднана з рядом сучасних технологій таких як сенсори, світлодіоди, плоскі дисплейні панелі, фотовольтаїчні комірки. Проект передбачає ряд ініціатив для розвитку альтернативних технологій, щоб привести на ринок нові рішення з оптимізованим співвідношенням ціна/якість. Підходи що використовують тонкі плівки ЛХРК

напівпровідників (описаних в даному проекті) відкривають унікальні можливості для вказаного ряду особливостей поряд з необхідною функціональністю. Проект є дуже перспективними для виготовлення гнучких сенсорів вологості, дешевих сонячних елементів, радіочастотних ідентифікаційних марок (трансподерів), електронних штрих-кодів, чи активних матричних елементів для дисплей.

Примітка: Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування.

Науковий керівник Проекту

Завідувач відділу ФК ІФ НАНУ

Назаренко Василь Геннадійович



(підпис)