***Слайд №1***

***Доброго дня. Представляю до Вашої уваги свою наукову роботу на тему:***ПОЄДНАННЯ ФОСФОРЕСЦЕНТНОЇ ТА ЕКСИПЛЕКСНОЇ ЕМІСІЇ ДЛЯ СТВОРЕННЯ ВИСОКОЕФЕКТИВНИХ ОРГАНІЧНИХ СВІТЛОВИПРОМІНЮЮЧИХ ДІОДІВ.

***На екрані ви бачите просторову будову бінарних комплексів THCA:FIrpic.*** *До цих комплексів входять* флуоресцентний карбазольний емітер THCA ,фосфоресцентний емітер FIrpic та можливі комплекси зіткнення цих речовин, що *здатні випромінювати світло при дії електричного струму.* ***Слайд №2***

***Тому вони є перспективним матеріалом в створенні органічних світло випромінюючих діодів, які сьогодні використовують в новітніх технологіях таких як***:

# 1) Гнучкі екрани телевізорів з 3D зображенням

# 2)Алфавітно-цифрові диспеї

# 3)Цифрові камери

4)GРS-навігатори.

**Слайд №3**

***Тому метою даної роботи було:*** *теоретично дослідити квантово-хімічну будову та спектрально-люмінесцентні властивості молекул THCA, FIrpicта їх бінарних комплексів.*

***Слайд№4
Актуальність проведеного дослідження полягає*** *у доцільності створення ефективних та економічних джерел енергії з тепло-білим випромінюванням, яке є корисним для людського ока та сприяє регенерації зорового пігменту родопсину в темний час доби (за відсутності денного освітлення).*

***Слайд №5***

**Для досягнення мети поставлені наступні завдання:**

* *провести огляд літератури з проблематики дослідження;*
* *визначити оптимальну методику квантово-хімічного моделювання будови та електронних спектрів поглинання молекулTHCA, FIrpicта їх бінарних комплексів;*
* *провести віднесення смуг поглинання та випромінювання у спектрах THCA, FIrpic, їх суміші та прототипу ОСВД на основі зазначених матеріалів;*
* *запропонувати ексиплексну модель випромінювання у довгохвильовій області спектру електролюмінісценції пристрою ОСВД.*

***Слайд №6***

***Наукова новизна полягає у тому****, що механізм світлогенерації в ОСВД на основі емітерів* ***THCA*** *та* ***FIrpic*** *раніше не досліджувався та є принципово новимдля даного типу діодів.* ***Передбачається, що запропонована*** *модель може застосовуватися в мобільних телефонах, автомобільних бортових комп’ютерах, МР3-плеєрах, цифрових індикаторах в приладах нічного бачення і т. п .*Вона вже зараз популярна серед багатьох розробників вузької спрямованості, продукція яких не потребує використання великого повнокольорового екрану.

***Слайд №7***

***Що ж представляють собою ОСВД і який принцип їхньої роботи***.
Випромінювання світла відбувається в електролюмінісцентному шарі(від катоду поступають електрони, а від аноду – дірки) органічного напівпровідника. Матеріал світловипромінюючого шару в якому відбувається рекомбінація електронів та дірок мігруючих один до одного , утворює екситон який «гине» . В результаті чого випромінюється фотон.

***Слайд*№8**

**На екрані зображений найпростіший одношаровий пристрій ОСВД**, складу ITO/Alq3/Al

це скляна пластина через яку виходить генероване випромінювання. На скло нанесені 3 шари:

1 шар відіграє роль анода (у більшості випадків – це індій оксид допований оловом) (ІТО);

2 шар органічний емітер (в якому роль емісійного шару виконує алюміній *трис*-(8-гідроксохінолінат) (Alq3)

3 шар метал з низькою роботою виходу (Аl) – катод.

Електрони з катода надходять на нижчу вакантну молекулярну орбіталь (НВМО), а дірки з aнода надходять на вищу зайняту молекулярна орбіталь (ВЗМО) речовини-емітера (Alq3). Під дією електричного поля заряди рухаються назустріч один одному і, зіткнувшись, рекомбінують, переходячи на збуджені рівні. Дірка, так само як електрон, має власний спін то при рекомбінаці, можливі два збуджених стани системи: з антипаралельною орієнтацією спінів (синглетний стан) і з паралельною орієнтацією спінів – енергетично більш вигідний триплетний стан (включає три підрівні).

 За спіновою статистикою заселеність усіх 4-х підрівнів однакова, тому синглентних (S1) екситонів утворюється 25%, а триплетних – 75%

Для флуоресцентних емітерів, до числа яких належить і Alq3, перехід Т1 S0 є спін-забороненим. Таким чином, квантовий вихід флуоресценції ОСВД не може перевищувати 25%. При наявності в молекулі важкого металу спін-орбітальна взаємодія послаблює заборону на перехід Т1 S0 і можливе збільшення квантового виходу.

***Слайд*№9**

Прототип ОСВД, що обговорюється в даній роботібув виготовлений за допомогою вакуумного осадження органічних напівпровідникових шарів і металевих електродів на попередньо очищену скляну підкладку CuI/ (ITO) – анод 1 шар.

2 шар (емісійний) 3,6-ди-(9-карбазол)-9-(2-етилгексил)карбазолу (TCz1) були використані в якості дірково-провідного та електроно-транспортного матеріалів.

*3 шар* Наношар кальцію, покритий зверху шаром алюмінію були використані в якості катода.

Таким чином, структура виготовленого пристрою може бути зображена наступним чином (товщина шарів вказана в дужках): ITO/CuI(8nm)/**THCA**(40nm)/**FIrpic**(9nm)/**TCz1**(10nm)/Ca(50nm):Al(200nm).

***Слайд* № 10**

Спектр електролюмінісценції діоду ITO/CuI/**THCA**/**FIrpic**/TCz1/Ca:Al, характеризуються трьома основними смугами. Зокрема,

1. Низькоінтенсивна смуга в області 470 нм відповідає флуоресцентному випромінюванню **ТHСА** та фосфоресцентному світінню **FIrpic**,
2. Дві інші довгохвильові смуги 575 та 650 нм відповідають ексиплексному випромінюванню, що не є характерним для окремих плівок **ТНСА** та **FIrpic**.

Для порівняння, у спектрі фосфоресценції комплексу **FIrpic**, виміряному при 77 К (червона крива), спостерігається та ж сама смуга випромінювання з максимумом близько 470 нм (по аналогії зі спектром електролюмінесценції пристрою ОСВД). Дана смуга чітко простежується і в спектрі фосфоресценції суміші **THCA**:**FIrpic** (чорна крива), але зі значно нижчою інтенсивністю, що доводить фосфоресцентну природу випромінювання комплексу FIrpic на 470 нм як у вільному стані, так і у складі композицій з **ТНСА** за різних температур.

***Слайд* № 11**

Вимірювання часу затухання випромінювання на довших довжинах хвиль (570 та 670 нм) також засвідчило їх мікросекундний порядок, що свідчить про триплетну природу відповідних ексиплексів, що формуються на межі поділу фаз **THCA** та **FIrpic**.

***Слайд* № 13**

**С**вітлотехнічні характеристики електролюмінісцентного пристрою а саме енергоефективність(А) та вихід за струмом (Б) залежать від густини струму.

***Слайд* № 14**

Встановлено, що даний ОСВД виявляє низьку напругу перемикання (Von) 2.3 В для електролюмінесценції 2 кд/м2. Можна сказати, що низьке значення Von характеризує поліпшення інжекції носіїв заряду в ОСВД. Пристрій продемонстрував високе поточне значення ефективності 15 Кд/А, максимальну яскравість 38000 кд/м2 при напрузі 15 В та зовнішню квантову ефективність близько 5%.

Современные **телевизоры** имеют **яркость экрана** в 400-500 кд/м2

***Слайд* № 15**

Для пояснення спостережуваних спектрів PL і EL матеріалів **THCA**, **FIrpic** та їх суміші **THCA:FIrpic** нами виконані квантово-хімічні розрахунки на рівні методу теорії функціоналу густини (DFT) та її нестаціонарного варіанту (TD DFT). Всі розрахунки методами DFT і TDDFT були виконані за допомогою программного комплексу Gaussian 09 . Була встановлена просторова структура модельних бінарних комплексів **THCA:FIrpic**. Ці моделі були побудовані на основі наступних принципів: молекули **THCA** і **FIrpic** повинні перекриватися паралельними площинами карбазольного фрагменту **ТНСА**, з одного боку, та флуорофенілпіридинового або піколінатного фрагментів з іншого боку.

***Слайд* № 16**

Розрахована енергія рівнів збуджених S1 і T1 станів комплексів **THCA**:**FIrpic** кількісно добре узгоджуються з експериментальними спостереженнями. Тут слід зазначити, що експериментальні положення енергії T1 рівня для **THCA**, **FIrpic** і **THCA:FIrpic** були розраховані виходячи із положення максимумів у відповідних спектрах фосфоресценції, в той час, як експериментальна оцінка енергії S1 стану для окремих молекул **THCA** і **FIrpic** була запозичена з літературних джерел.

***Слайд* № 17**

Під час роботи ми прийшли до таких висновків:

* Технології органічних світловипромінюючих діодів має переваги за показниками яскравості, контрастності та світлоефективності перед рідкокристалічними технологіями.
* Основним завданням цих технологій є залучення до виконання роботи триплетних збуджених станів.
* Зіркоподібні похідні карбазолу, які володіють гарними показниками електрон-діркової провідності та люмінесценції є перспективними об’єктами оптичного тюнінгу.
* На прикладі новоствореного світловипромінюючого діоду, який поєднує два електролюмінісцентні шари (флуоресцентний та фосфоресцентний емітери), показано, що на межі поділу цих шарів формуються ексиплексні збуджені стани. Експериментально це спостерігається у вигляді уповільненої флуоресценції, якій приписується ексиплексна природа.