

Физические основы молекулярной электроники

1) Краткое содержание дисциплины.

В рамках дисциплины «Физические основы молекулярной электроники» изучаются современные представления о физических и химических свойствах различных молекулярных материалов, об особенностях их электронного строения и возможных областях применения.

2) Кредитная стоимость дисциплины.

3,5 Ст ECTS (3 ЗЕТ, 108 ач, включая экзамен)

3) Цель

Целью изучения дисциплины является подготовка высококвалифицированных специалистов, владеющих теоретическими знаниями и практическими навыками в области физики молекулярных твердых тел, и способных на основе полученных знаний к активной творческой работе в области технической физики и нанотехнологий как в научно-исследовательских учреждениях, так и в условиях промышленного производства.

Это полностью соответствует цели основной образовательной программы подготовки выпускников-магистров по направлению 223200 «Техническая физика», которой является формирование у них знаний, умений, навыков, обеспечивающих способность к самостоятельной творческой профессиональной деятельности в условиях быстро развивающихся наукоемких отраслей техники и технологии.

4) Результаты обучения:

Знания, навыки, умения:

- знание новейших достижений фундаментальной науки в области молекулярной электроники и возможности их использования в практике;
- знание физических принципов и явлений, используемых для совершенствования известных и создания новых физико-технических объектов и технологий;
- умение: взаимодействовать со специалистами в других предметных областях, осуществлять поиск научно-технической и образовательной информации;
- владение интерпретацией результатов научного исследования, методологией научных исследований;
- умение применять физические принципы и явления для решения прикладных задач;
- владение методами интерпретации физических явлений молекулярной электроники.

Компетенции:

ОК-2, способность к самостоятельному обучению новым методам исследования, пополнению своих знаний в области современных проблем технической физики и смежных наук, готовность к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности, к изменению социокультурных и социальных условий деятельности.

ПК-7, способность самостоятельно выполнять физико-технические научные исследования для оптимизации параметров объектов и процессов с использованием стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств.

ПК-8, готовность осваивать и применять современные физико-математические методы и методы искусственного интеллекта для решения профессиональных задач, составлять практические рекомендации по использованию полученных результатов.

ПК-21, готовность и способность применять физические методы теоретического и экспериментального исследования, методы математического анализа и моделирования для постановки задач по развитию, внедрению и коммерциализации новых наукоемких технологий.

ПК-23 готовность к участию в организации и проведении инновационного образовательного процесса.

5) Содержание:

1. Введение: Л 1 ач

2. Структура и свойства молекул органических соединений

2.1. Электронное строение молекул: Л – 1 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 1 ач.

2.2. Химические связи в молекулах органических соединений: Л – 2 ач, ПЗ – 2 ач, СР – 2 ач

2.3. Фуллерены и нанотрубки: Л – 1 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.

2.4. Макромолекулы полимеров: Л – 2 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.

- 2.5. Поляризуемость молекул: Л – 2 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
3. Особенности строения, структуры и свойств молекулярных твердых тел
- 3.1. Типы межмолекулярного взаимодействия: Л – 1 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 1 ач.
- 3.2. Органические молекулярные кристаллы: Л – 2 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 3 ач.
- 3.3. Молекулярная организация и морфология полимеров: Л – 1 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 3.4. Процессы генерации и рекомбинации носителей заряда в органических молекулярных телах: Л – 1 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 3.5. Прыжковый механизм переноса носителей заряда: Л – 2 ач, СР – 2 ач.
4. Материалы молекулярной электроники
- 4.1. Фуллерит: ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 4.2. Ленгмюровские пленки: ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 4.3. Жидкие кристаллы: ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 4.4. Полимерные материалы: Л – 2 ач, ПЗ – 1 ач, СР – 3 ач.
5. Элементная база молекулярной электроники
- 5.1. Органические полевые транзисторы (ОПТ): ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 5.2. Органические светоизлучающие диоды (ОСД): ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 5.3. Органические солнечные фотоэлементы (ОСЭ): ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
- 5.4. Полимерные запоминающие устройства (ПЗУ): ПЗ – 1 ач, СР – 2 ач.
6. Экзамен: 36 ач.

6) Пререквизиты:

Изучение дисциплины опирается на знания, полученные при изучении дисциплин «Физика», «Материаловедение и технология конструкционных материалов», «Физика твердого тела и полупроводников», «Химия», «Органическая химия», «Квантовая механика» и «Статистическая физика» предшествующей бакалаврской подготовки.

Результаты изучения дисциплины используются при изучении ряда дисциплин вариативной части профессионального цикла, при проведении НИРМ и при подготовке магистерской диссертации.

7) Основной учебник

- «Молекулярная электроника и углеродные наноструктуры.» [учебное пособие]/ И.Б. Захарова, Т.Л. Макарова — СПб., 2008
- Электрические свойства полимеров. / Э. Р. Блайт, Д. Блур — М. Физматлит, 2008

8) Дополнительная литература

- Молекулярная электроника. Учеб. пособие. / Н.В. Агринская — Санкт-Петербург: Изд-во СПбГПУ, 2004
- Жидкие кристаллы. / С. Чандрасекар 1. — Москва Мир, 1980
- Электронные свойства неупорядоченных систем. Учеб. пособие. / А.Г. Забродский, С.А. Немов, Ю.И. Равич — Санкт-Петербург: Наука, 2000

9) Координатор:

Профессор, д.ф.-м.н. Н.Т. Сударь

10) Использование компьютера:

Компьютер используется при выполнении практических занятия и самостоятельной работы по всем разделам дисциплины.

11) Лабораторные работы и проекты

Лабораторные работы и проекты учебным планом не предусмотрены.

Качество освоенного материала дисциплины контролируется по итогам индивидуальных заданий, контроль которых осуществляется посредством проведения интерактивных проблемных лекций (семинаров). Оценка, являющаяся результатом усреднения оценок, полученных в результате выполнения указанных выше заданий – допуск к экзамену. Итоговая оценка выставляется по результатам экзамена

Перечень экзаменационных вопросов.

1. Основные приближения теории химической связи. Приближение Борна-Опенгеймера. Валентные орбитали.
2. Образование молекул. Метод молекулярных орбиталей (МО). Связующие и разрыхляющие орбитали.
3. Электронная конфигурация атома углерода. Валентные орбитали в атоме углерода.
4. Гибридные орбитали. Типы гибридных орбиталей.
5. Химические связи в молекулах метана, этилена, ацетилена.
6. Сопряженные химические связи. Ароматические углеводороды. Молекула бензола.
7. Фуллерены.
8. Энергия возбуждения π -электронов в сопряженных системах. Синглетные и триплетные состояния сопряженных систем.
9. Флуоресценция и фосфоресценция.
10. Молекулы в электрических полях. Дипольные и квадрупольные моменты молекул.
11. Поляризуемость молекул электрическим полем. Собственный и наведенный дипольные моменты молекул.
12. Виды поляризуемости диэлектриков. Электронная, ионная упругая и ориентационная поляризации.
13. Типы межмолекулярного взаимодействия в молекулярных телах. Ван-дер-Ваальсовы силы. Водородная связь. Донорно-акцепторная связь.
14. Энергия ионизации и сродство к электрону органических молекул.
15. Поляризационное взаимодействие носителя заряда с окружением в органическом молекулярном кристалле (ОМК).
16. Электронная поляризация в ОМК. Энергия электронной поляризации.
17. Метод электростатического приближения. Электронный полярон.
18. Ионизованные состояния в идеальном ОМК. Модель Лайонса.
19. Молекулярная (вибронная) релаксация. Молекулярный полярон.
20. Решеточная релаксация. Решеточный полярон.
21. СТ- и СР-состояния в ОМК.
22. Реальные ОМК. Роль структурных дефектов в образовании электронных локальных состояний в ОМК.
23. Образовании электронных локальных состояний в ОМК при отклонении межмолекулярного расстояния от среднего значения.
24. Вакансии, дислокационные дефекты их влияние на образовании электронных локальных состояний в ОМК
25. Возбужденные нейтральные состояния в ОМК. Слабо и сильно связанные экситоны.
26. Энергетическая структура молекулярных экситонов. Давыдовское расщепление.
27. Поверхностные экситоны.
28. Конденсированная фаза экситонов.
29. Избыточные электроны в молекулярных телах.
30. Подвижность квазисвободных электронов Микроскопическая подвижность.
31. Равновесный и неравновесный транспорт носителей заряда.
32. Дрейфовая подвижность. Определение дрейфовой подвижности времяпролетным методом.
33. Экспериментальные закономерности квазиравновесного транспорта.
34. Зависимость дрейфовой подвижности от температуры и напряженности электрического поля.
35. Понятие об эффективной подвижности. Взаимосвязь между эффективной, дрейфовой и микроскопической подвижностями.
36. Захват носителей заряда на ловушки. Понятие об энергетической плотности ловушечных состояний.
37. Опустошение ловушек. Глубокие и мелкие ловушки.
38. Уравнение баланса. Расчет концентрации электронов на ловушках в стационарном случае. Квазиуровень Ферми.
39. Прыжковая проводимость в ОМТТ. Модель Абрахамса-Миллера.

40. Сетка сопротивлений Абрахамса-Миллера.
41. Аморфные полимеры.
42. Аморфно-кристаллические полимеры.
43. Релаксационные процессы в полимерах.
44. Особенности фотогенерации носителей заряда в органических материалах.
45. Электронно-дырочная рекомбинация.
46. Безизлучательная дезактивация молекул.
47. Прыжки между соседними узлами.
48. Проводимость с переменной длиной прыжка. Закон Мота.
49. Понятие о транспортном уровне.
50. Инжекция носителей заряда в ОМТТ. Формы потенциального барьера на границе электрод-ОМТТ при инжекции электронов и дырок.
51. Ленгмюровские пленки.
52. Классификация жидких кристаллов.
53. Анизотропия электрических и оптических свойств жидких кристаллов.
54. Электрооптические эффекты в жидких кристаллах.
55. Органические полевые транзисторы.
56. Органические светоизлучающие диоды.