

**ГОУ ВПО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ)
УНИВЕРСИТЕТ**

Составлен в соответствии с государственными требованиями к минимуму содержания и уровню подготовки выпускников по направлению 11.04.04 – Электроника и нанoeлектроника и Положением «Об УМКД РАУ».

УТВЕРЖДАЮ:



Инженерно-физический институт

Кафедра технологии материалов и структур электронной техники

Автор: д.ф.-м.н., и.о. профессор Мамасакхлисов Евгений Шамильевич

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

**Дисциплина: Б1.0.04 «Физические основы молекулярной
электроники»**

Направление: 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника»

**Основная образовательная программа магистратур:
«Квантовая и оптическая электроника»**

ЕРЕВАН 2023

1. Аннотация

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.

Цель преподавания дисциплин:

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.

Учебная задача: Задачи курса состоят в изложении основных понятий, необходимых для описание физических процессов, протекающих в материалах и устройствах молекулярной электроники, включая полимеры, углеродные нанотрубки, молекулярные кристаллы и т. д.

Основные методы проведения занятий. лекции, семинары.

Список литературы: содержит 4 наименования книг и монографий отечественных и зарубежных авторов, 3 научных статьи; этот список поможет студентам освоить и создать свой профессиональный исследовательский инструментарий, обеспечить целостность обучения.

Краткое содержание курса: Электронное строение молекул. Химические связи в молекулах органических соединений. Фуллерены и нанотрубки. Макромолекулы полимеров. Поляризуемость молекул. Типы межмолекулярного взаимодействия. Органические молекулярные кристаллы. Молекулярная организация и морфология полимеров. Процессы генерации и рекомбинации носителей заряда в органических молекулярных телах. Прыжковый механизм переноса носителей заряда. Фуллерит. Ленгмюровские пленки. Жидкие кристаллы. Полимерные материалы. Органические полевые транзисторы. Органические светоизлучающие диоды. Органические солнечные фотоэлементы. Полимерные запоминающие устройства.

2. Требования к исходным уровням знаний и умений студентов

квантовая механика, статистическая физика и термодинамика.

3. Цель и задачи дисциплины

Основная цель изучаемой дисциплины — ознакомление студентов с процессами возникновения и переноса заряда в системах, содержащих органические молекулы. Подготовка

<i>Тема 4.3. Органические солнечные фотоэлементы</i>	0.5	0.5			
<i>Тема 4.4. Полимерные запоминающие устройства</i>	0.5	0.5			
ИТОГО	34	18	-	16	-

7.2 Содержание разделов и тем дисциплины

МОДУЛЬ 1.

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Введение

Общие сведения о материалах и устройствах молекулярной электроники. Их значение для фундаментальной и прикладной науки. Области применений.

Раздел 1. Структура и свойства молекул органических соединений

Тема 1.1. Электронное строение молекул ([1])

Тема 1.2. Химические связи в молекулах органических соединений

Физические свойства многоэлектронных систем. Принципы образования органических молекул ([1], [3])

Тема 1.3. Фуллерены и нанотрубки ([1], [5])

Структура и физические свойства графена, фуллеренов и углеродных нанотрубок

Тема 1.4. Макромолекулы полимеров

Химическая структура полимеров. Структура и свойства полимеров. Их жесткость и упругость. ([2])

Тема 1.5. Поляризуемость молекул

Эффекты поляризации в органических молекулах и кристаллах ([1], [4])

Раздел 2. Особенности строения, структуры и свойств молекулярных твердых тел

Тема 2.1. Типы межмолекулярного взаимодействия

Ван-дер-Ваальсовы, кулоновские, диполь-дипольные взаимодействия. Водородные ионные и др. связи ([1], [3], [4])

Тема 2.2. Органические молекулярные кристаллы ([3], [4])

Физические основы формирования молекулярных кристаллов. Их структура, механические свойства и проводимость.

Тема 2.3. Молекулярная организация и морфология полимеров

Макромолекулы в растворе. Кристаллические и аморфно — кристаллические полимеры ([2]).

Тема 2.4. Процессы генерации и рекомбинации носителей заряда в органических молекулярных телах ([4], [5], [6], [7])

Тема 2.5. Прыжковый механизм переноса носителей заряда ([4], [5], [6], [7])

Основные механизмы переноса зарядов в органических полупроводниках. Поляронные модели. Неупорядоченные модели.

Раздел 3. Материалы молекулярной электроники

Тема 3.1. Фуллерит

Электрические, структурные и термодинамические свойства фуллеритов ([3,4])

Тема 3.2. Ленгмюровские пленки

Основные принципы формирования пленок Ленгмюра — Блоджет. Механизмы переноса заряда в ленгмюровских пленках ([1], [3], [4])

Тема 3.3. Жидкие кристаллы

Тема 3.4. Полимерные материалы

Термодинамические, оптические и электрические свойства жидких кристаллов и полимеров ([1], [3], [4])

Раздел 4. Элементная база молекулярной электроники

Тема 4.1. Органические полевые транзисторы

Тема 4.2. Органические светоизлучающие диоды

Тема 4.3. Органические солнечные фотоэлементы

Тема 4.4. Полимерные запоминающие устройства

Физические свойства и принципы производства элементной базы молекулярной электроники ([1], [3], [4], [6], [7]).

7.3 Вопросы

- 1. Основные приближения теории химической связи. Приближение Борна-Опенгеймера.***
- 1. 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 -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.*
14. *Водородная связь. Донорно-акцепторная связь.*
15. *Энергия ионизации и сродство к электрону органических молекул.*
16. *Поляризационное взаимодействие носителя заряда с окружением в органическом молекулярном кристалле (ОМК).*
17. *Электронная поляризация в ОМК. Энергия электронной поляризации.*
18. *Метод электростатического приближения. Электронный полярон.*
19. *Ионизованные состояния в идеальном ОМК. Модель Лайонса.*
20. *Молекулярная (вибронная) релаксация. Молекулярный полярон.*
21. *Решеточная релаксация. Решеточный полярон.*
22. *СТ- и СР-состояния в ОМК.*
23. *Реальные ОМК. Роль структурных дефектов в образовании электронных локальных состояний в ОМК.*
24. *Образовании электронных локальных состояний в ОМК при отклонении межмолекулярного расстояния от среднего значения.*
25. *Вакансии, дислокационные дефекты их влияние на образовании электронных локальных состояний в ОМК*
26. *Возбужденные нейтральные состояния в ОМК. Слабо и сильно связанные экситоны.*
27. *Энергетическая структура молекулярных экситонов. Давыдовское расщепление.*
28. *Поверхностные экситоны.*
29. *Конденсированная фаза экситонов.*
30. *Избыточные электроны в молекулярных телах.*
31. *Подвижность квазисвободных электронов Микроскопическая подвижность.*
32. *Равновесный и неравновесный транспорт носителей заряда.*

33. *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.*
40. *Аморфные полимеры.*
41. *Аморфно-кристаллические полимеры.*
42. *Релаксационные процессы в полимерах.*
43. *Особенности фотогенерации носителей заряда в органических материалах.*
44. *Электронно-дырочная рекомбинация.*
45. *Безизлучательная дезактивация молекул.*
46. *Прыжки между соседними узлами.*
47. *Проводимость с переменной длиной прыжка. Закон Мота.*
48. *Понятие о транспортном уровне.*
49. *Инжекция носителей заряда в ОМТТ. Формы потенциального барьера на границе электрод-*
50. *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.*

8. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

8.1. Рекомендуемая литература

а) Основная литература

- [1] Г.С. Плотников, В.Б. Зайцев. Физические основы молекулярной электроники. Физ. Ф-тет МГУ, М., 2000.
- [2] Э.Р. Блайт, Д. Блур. Электрические свойства полимеров. Физматгиз, М., 2008.
- [3] M.C. Petty, Molecular electronics. From principles to practice. Wiley Interscience & Sons, 2007.
- [4] J.C. Cuevas, E. Scheer, Molecular electronics. An introduction to theory and experiment. World scientific, Singapore, 2010.

б) Дополнительная литература

- [5] А.В. Елецкий, Углеродные нанотрубки, УФН, т. 167, 945- 972.
- [6] C. Tanase et al., Local charge carrier mobility in disordered organic field-effect transistors, Organic Electronics 4 (2003) 33–37
- [7] V. Coropceanu et al. Charge Transport in Organic Semiconductors, Chem. Rev. 2007, 107, 926–952

8.2. Программные средства освоения дисциплины

Matlab. 2016a

8.3. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютер, проектор

Учебная программа:

Одобрена кафедрой Общей физики и квантовых наноструктур

Зав. кафедрой: Айрапетян Д.Б.

(подпись)