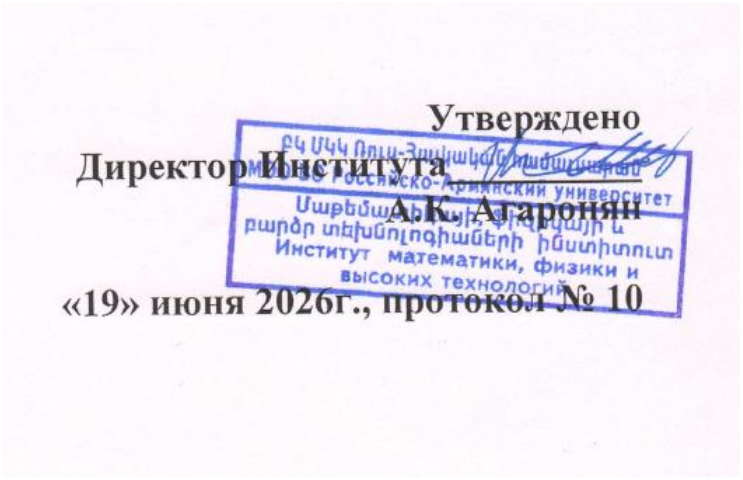
Межгосударственная образовательная организация высшего образования
«Российско-Армянский университет»



Утверждено
Директор Института А.К. Агаронян
«19» июня 2026г., протокол № 10

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины: Б1.0.04 «Физические основы молекулярной электроники»

Автор (ы) д.ф.-м.н. Мамасахлисов Евгений Шамильевич
Ф.И.О, ученое звание (при наличии), ученая степень (при наличии)

Направление подготовки: 11.04.04 Электроника и наноэлектроника
Наименование образовательной программы: Квантовая и оптическая электроника

Согласовано:

Заведующий Кафедрой общей физики и квантовых наноструктур

Айрапетян Д.Б.



(подпись)

1. АННОТАЦИЯ

1.1. Краткое описание содержания данной 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.

1.2. Трудоемкость в академических кредитах и часах, формы итогового контроля (экзамен/зачет);

4 академических кредита / 144 часа. Форма итогового контроля — экзамен.

1.3. Взаимосвязь дисциплины с другими дисциплинами учебного плана специальности (направления)

Фотоэлектрические п/п преобразователи солнечной энергии, Полупроводниковая наноэлектроника

1.4. Результаты освоения программы дисциплины:

Код компетенции *(в соответствии рабочим с учебным планом)*	**Наименование компетенции** *(в соответствии рабочим с учебным планом)*	**Код индикатора достижения компетенций** *(в соответствии рабочим с учебным планом)*	**Наименование индикатора достижений компетенций***(в соответствии рабочим с учебным планом)*
ОПК-3	Способен приобретать и использовать новую информацию в своей предметной области, предлагать новые идеи и подходы к решению инженерных задач	ОПК-3.1	Демонстрирует понимание типовых процедур применения проблемно-ориентированных прикладных программных средств в профессиональной сфере деятельности. Демонстрирует понимание типовых этапов инновационной деятельности и трансфера технологий;

		ОПК-3.2	Использует современные информационные технологии, способствующие повышению эффективности научной деятельности;
		ОПК-3.3	Выполняет математическое моделирование приборов и технологических процессов с использованием современных информационных технологий.

2. УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА

2.1. Цели и задачи дисциплины

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.

2.2. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы (в академических часах и зачетных единицах) ***(удалить строки, которые не будут применены в рамках дисциплины)***

Виды учебной работы	**Всего, в акад. часах**	**Распределение по семестрам**
		1 сем
1	**2**	**3**
1. Общая трудоемкость изучения дисциплины по семестрам, в т. ч.:	**144**	**144**

1.1. Аудиторные занятия, в т. ч.:	**32**	**32**
1.1.1.Лекции	**16**	**16**
1.1.2.Практические занятия, в т. ч.	**16**	**16**
1.2. Самостоятельная работа, в т. ч.:	**76**	**76**
Итоговый контроль (Экзамен, Зачет, диф. зачет - указать)	**Экзамен 36**	**Экзамен 36**

2.3. Содержание дисциплины

2.3.1. Тематический план и трудоемкость аудиторных занятий (модули, разделы дисциплины и виды занятий) по рабочему учебному плану

Разделы и темы дисциплины	**Всего (ак. часов)**	**Лекции(ак. часов)**	**Практ. Занятия (ак. часов)**
1	**2=3+4+5+6+7**	**3**	**4**
МОДУЛЬ 1. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ	54	18	36
Введение	1	1	-
Раздел 1. Структура и свойства молекул органических соединений	13	5	-
Тема 1.1. Электронное строение молекул	2	1	-
Тема 1.2. Химические связи в молекулах органических соединений	3	1	-
Тема 1.3. Фуллерены и нанотрубки	3	1	
Тема 1.4. Макромолекулы полимеров	3	1	
Тема 1.5. Поляризуемость молекул	2	1	
Раздел 2. Особенности строения, структуры и свойств молекулярных твердых тел	14	5	-
Тема 2.1. Типы межмолекулярного взаимодействия	2	1	-
Тема 2.2. Органические молекулярные кристаллы	3	1	-
Тема 2.3. Молекулярная организация и морфология полимеров	3	1	-

Тема 2.4. Процессы генерации и рекомбинации носителей заряда в органических молекулярных телах	3	1	
Тема 2.5. Прыжковый механизм переноса носителей заряда	3	1	
Раздел 3. Материалы молекулярной электроники	12	4	-
Тема 3.1. Фуллерит	2	1	-
Тема 3.2. Ленгмюровские пленки	2	1	-
Тема 3.3. Жидкие кристаллы	4	1	
Тема 3.4. Полимерные материалы	4	1	
Раздел 4. Элементная база молекулярной электроники	14	3	-
Тема 4.1. Органические полевые транзисторы	4	1	-
Тема 4.2. Органические светоизлучающие диоды	4	1	-
Тема 4.3. Органические солнечные фотоэлементы	4	0.5	
Тема 4.4. Полимерные запоминающие устройства	2	0.5	
ИТОГО	54	18	36

2.3.2. Краткое содержание разделов дисциплины в виде тематического плана

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])

Струкура и физические свойства графена, фуллеренов и углеродных нанотрубок

Тема 1.4. Макромолекулы полимеров

Химическая струкрура 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]).

2.3.3. Краткое содержание семинарских/практических занятий/лабораторного практикума

Семинары и практические занятия направлены на закрепление теоретического материала, изучение молекулярных и кристаллических структур, анализ механизмов переноса заряда, а также принципов работы устройств молекулярной электроники. Включены обсуждения научных публикаций и работа с учебными материалами.

2.3.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- Мультимедийное оборудование для лекций.
- Компьютерная аудитория с установленным программным обеспечением Matlab 2016a

2.4. Модульная структура дисциплины с распределением весов по формам контролей

Формы контролей	Вес формы (форм) текущего контроля в результирующей оценке текущего контроля (по модулям)		Вес формы промежуточного контроля в итоговой оценке промежуточного контроля		Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей		Вес итоговой оценки промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей (семестровой оценке)	Веса результирующей оценки промежуточных контролей и оценки итогового контроля в результирующей оценке итогового контроля
Вид учебной работы/контроля	**M1**[1]	**M2**	**M1**	**M2**	**M1**	**M2**		
Контрольная работа *(при наличии)*			0.5	0.5				
Устный опрос *(при наличии)*								
Лабораторные работы *(при наличии)*	0.5	0.5						
Письменные домашние задания *(при наличии)*								
Решение задач	0.5	0.5						
Веса результирующих оценок текущих контролей в итоговых оценках промежуточных контролей					0.5	0.5		
Веса оценок промежуточных контролей в итоговых оценках промежуточных контролей								
Вес итоговой оценки 1-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0.5	
Вес итоговой оценки 2-го промежуточного контроля в результирующей оценке промежуточных контролей							0.5	
Вес результирующей оценки промежуточных контролей в результирующей оценке итогового контроля								0.5
Вес итогового контроля (Экзамен/зачет) в результирующей оценке итогового контроля								0.5
	∑ = 1	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**	**∑ = 1**

3. Теоретический блок *(указываются материалы, необходимые для освоения учебной программы дисциплины)*

3.1. Материалы по теоретической части курса

3.1.1. Учебник(и);

[1] Г.С. Плотников, В.Б. Зайцев. Физические основы молекулярной электроники. Физ. Ф-тет МГУ, М., 2000.

[1] Учебный Модуль

[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.

[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

4. Фонды оценочных средств ***(указываются материалы, необходимые для проверки уровня знаний в соответствии с содержанием учебной программы дисциплины).***

4.1. Планы практических и семинарских занятий

№	Тема занятия	Цель и содержание
1	Электронное строение органических молекул	Разбор молекулярных орбиталей, химических связей, распределения зарядов.
2	Наноструктуры: фуллерены и углеродные нанотрубки	Структура, электронные свойства, обсуждение практических применений.
3	Макромолекулы и полимеры	Сравнение аморфных и кристаллических полимеров, механические характеристики.
4	Межмолекулярные взаимодействия	Роль Ван-дер-Ваальсовых и водородных связей в молекулярных кристаллах.
5	Перенос заряда в органических кристаллах	Модели переноса: поляронная, прыжковая. Расчёт параметров.
6	Ленгмюровские пленки и жидкие кристаллы	Принципы формирования, морфология, физические свойства.
7	Элементная база молекулярной электроники	Схемы работы и сравнение параметров ОПТ, OLED и органических фотоэлементов.
8	Презентации студентов и обсуждение статей	Разбор современных научных исследований в области молекулярной электроники.

4.2. Материалы по практической части курса

4.2.1. Задачники (практикумы);

1.Зверев В. С., Чижов В. А., *Физика молекулярной электроники: задачи и упражнения*. — М.: Физматлит, 2019. — 248 с.

2.Кухарчук В. В., *Молекулярная электроника: сборник задач и упражнений*. — СПб.: БХВ-Петербург, 2020. — 192 с.

4.3. Вопросы и задания для самостоятельной работы студентов

[1] Построить схему электронного строения фуллерена C_{60}, указать возможные типы связей.

[2] Рассчитать длину связи и геометрию типичной органической молекулы с π-сопряжением.

[3] Проанализировать влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства кристаллов органических молекул.

[4] Сравнить морфологию аморфного и частично кристаллизованного полимера.

[5] Обосновать возможность поляронного переноса заряда в фуллеритах.

[6] Провести сравнительный анализ структуры и свойств OLED и органических солнечных элементов.

[7] Объяснить механизм работы органического полевого транзистора.

[8] Рассчитать и сравнить оптические свойства жидких кристаллов и полимерных пленок.

[9] Привести примеры устройств на основе фуллеренов и их функциональное назначение.

[10] Выполнить аннотированный обзор одной научной статьи по молекулярной электронике.

4.4. Образцы вариантов контрольных работ, тестов и/или других форм текущих и промежуточных контролей

Контрольная работа (Вариант 1)

[1] Опишите электронное строение фуллерена и его влияние на проводимость.

[2] Перечислите и охарактеризуйте типы межмолекулярного взаимодействия.

[3] Объясните поляронную модель переноса заряда в органических полупроводниках.

[4] Сравните морфологию аморфного и частично кристаллизованного полимера.

4.5. Перечень экзаменационных вопросов

[1] Основные приближения теории химической связи. Приближение Борна-Опенгеймера.

[2] Валентные орбитали.

[3] Образование молекул. Метод молекулярных орбиталей (МО). Связующие и разрыхляющие орбитали.

[4] Электронная конфигурация атома углерода. Валентные орбитали в атоме углерода.

[5] Гибридные орбитали. Типы гибридных орбиталей.

[6] Химические связи в молекулах метана, этилена, ацетилена.

[7] Сопряженные химические связи. Ароматические углеводороды. Молекула бензола.

[8] Фуллерены.

[9] Энергия возбуждения -электронов в сопряженных системах. Синглетные и триплетные состояния сопряженных систем.

[10] Флуоресценция и фосфороресценция.

[11] Молекулы в электрических полях. Дипольные и квадрупольные моменты молекул.

[12] Поляризуемость молекул электрическим полем. Собственный и наведенный дипольные моменты молекул.

[13] Виды поляризуемости диэлектриков. Электронная, ионная упругая и ориентационная поляризации.

[14] Типы межмолекулярного взаимодействия в молекулярных телах. Ван-дер-Ваальсовы силы.

[15] Водородная связь. Донорно-акцепторная связь.

[16] Энергия ионизации и сродство к электрону органических молекул.

[17] Поляризационное взаимодействие носителя заряда с окружением в органическом молекулярном кристалле (ОМК).

[18] Электронная поляризация в ОМК. Энергия электронной поляризации.

[19] Метод электростатического приближения. Электронный полярон.

[20] Ионизованные состояния в идеальном ОМК. Модель Лайонса.

[21] 1Молекулярная (вибронная) релаксация. Молекулярный полярон.

[22] Решеточная релаксация. Решеточный полярон.

[23] СТ- и СР-состояния в ОМК.

[24] Реальные ОМК. Роль структурных дефектов в образовании электронных локальных состояний в ОМК.

[25] Образовании электронных локальных состояний в ОМК при отклонении межмолекулярного расстояния от среднего значения.

[26] Вакансии, дислокационные дефекты их влияние на образовании электронных локальных состояний в ОМК

[27] Возбужденные нейтральные состояния в ОМК. Слабо и сильно связанные экситоны.

[28] Энергетическая структура молекулярных экситонов. Давыдовское расщепление.

[29] Поверхностные экситоны.

[30] Конденсированная фаза экситонов.

[31] Избыточные электроны в молекулярных телах.

[32] Подвижность квазисвободных электронов Микроскопическая подвижность.

[33] Равновесный и неравновесный транспорт носителей заряда.

[34] Дрейфовая подвижность. Определение дрейфовой подвижности времяпролетным методом.

[35] 33. Экспериментальные закономерности квазиравновесного транспорта.

[36] Зависимость дрейфовой подвижности от температуры и напряженности электрического поля.

[37] Понятие об эффективной подвижности. Взаимосвязь между эффективной, дрейфовой и микроскопической подвижностями.

[38] Захват носителей заряда на ловушки. Понятие об энергетической плотности ловушечных состояний.

[39] Опустошение ловушек. Глубокие и мелкие ловушки.

[40] Уравнение баланса. Расчет концентрации электронов на ловушках в стационарном случае. Квазиуровень Ферми.

[41] Прыжковая проводимость в ОМТТ. Модель Абрахамса-Миллера.40. Сетка сопротивлений Абрахамса-Миллера.

[42] Аморфные полимеры.

[43] Амрфно-кристаллические полимеры.

[44] Релаксационные процессы в полимерах.

[45] Особенности фотогенерации носителей заряда в органических материалах.

[46] Электронно-дырочная рекомбинация.

[47] Безизлучательная дезактивация молекул.

[48] Прыжки между соседними узлами.

[49] Проводимость с переменной длиной прыжка. Закон Мота.

[50] Понятие о траспортном уровне.

[51] Инжекция носителей заряда в ОМТТ. Формы потенциального барьера на границе электрод-

[52] ОМТТ при инжекции электронов и дырок.

[53] Ленгмюровские пленки.

[54] Классификация жидких кристаллов.

[55] Анизотропия электрических и оптических свойств жидких кристаллов.

[56] Электрооптические эффекты в жидких кристаллах.

[57] Органические полевые транзисторы.

[58] Органические светоизлучающие диоды.

4.6. Образцы экзаменационных билетов

МОО ВО РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ, ФИЗИКИ И ВЫСОКИХ ТЕХНОЛОГИЙ
Кафедра общей физики и квантовых наноструктур

Направление: Электроника и наноэлектроника
Дисциплина: Физические основы молекулярной электроники
(магистратура I-ый курс, I-ый семестр)

Экзаменационный билет № **

1. Основные приближения теории химической связи. Приближение Борна-Опенгеймера..
2. Поверхностные экситоны.
3. Ленгмюровские пленки.

Зав. кафедройОФКН _____Д.Б. Айрапетян
20__г.