

Дослідження процесів локалізації і транспорту носіїв заряду в органічних напівпровідниках та їх наноструктурах

Исследование процессов локализации и транспорта носителей заряда в органических полупроводниках и их наноструктурах

Investigation of the charge carriers localization and transport processes in organic semiconductors and their nanostructures

- 1. Номер державної реєстрації теми - 0113U001910, № реєстрації в університеті 2603-ф**
- 2. Науковий керівник - д.ф.-м.н., проф. Горшков В.М., Горшков В.Н., Gorshkov Vyacheslav N.**

3. Суть розробки, основні результати.

(укр.)

Розроблені технологічні методи та виготовлені нові нанокompозити на основі напівпровідникових кремній-органічних полімерів полі(ді-п-гексилсилану) ПДГС та полі(метилфенілсилану) ПМФС, інкорпорованих в нанопористі кремнеземи з різним діаметром та геометрією пор. Контрольоване збільшення діаметра пор кремнеземів від 2.8 нм до 10 нм дозволило вперше дослідити оптичні властивості полімерів при переході від ізольованого полімерного ланцюгу до плівки та визначити можливості керованої їх зміни. Виявлено, що суттєвий вплив ефектів обмеження на досліджувані спектри є результатом конкуренції двох типів взаємодії: полімеру з поверхнею пор та міжмолекулярної взаємодії між полімерними ланцюгами. Вперше показано, що в результаті конкуренції цих взаємодій виникають нові структури полімерів в порах, що не спостерігались в плівках і розчинах полімерів. Доведено, що в обмеженому об'ємі нанопори виникають три нові форми полімерів, що мають гош-та транс-конформацію полімерних ланцюгів, а також їх агрегати. Виявлена наявність двох термохромних переходів для нанорозмірного ПДГС, що суттєво відрізняються від переходів для плівки і розчину полімеру.

Доведено суттєве скорочення процесів релаксації люмінесценції композитів та зростання (в 1.5 рази) її ефективності при кімнатній температурі в порівнянні з плівками полімерів внаслідок ефектів орієнтації та обмеження, що відкриває ширшу перспективу їх застосування в оптоелектронних пристроях в порівнянні з плівками полімерів.

Доведено існуванням в полімері двох просторово розділених центрів з різним розподілом сегментів по довжині та виникнення двох рідкокристалічних фаз в результаті орієнтації полімерних ланцюгів.

Для дослідження енергетичного спектру пасток в ПДГС використано розроблений нами модифікований метод фракційної термостимульованої люмінесценції, що дозволив значно збільшити його енергетичну роздільну здатність порівняно з традиційним та отримати коректні значення енергій активації пасток. Вперше доведено, що більшість фракційних енергій ПДГС утворюють систему горизонтальних полиць в залежності від температури, що свідчить про дискретність енергетичного спектру пасток. Отримані результати систематизовані на базі запропонованої нами моделі звільнення носіїв з пасток.

(рос.)

Разработаны технологические методы и изготовлены новые нанокompозиты на основе полупроводниковых кремний-органических полимеров поли (ди-п-гексилсилана) ПДГС и поли (метилфенилсилана) ПМФС, инкорпорированных в нанопористые кремнеземы с различным диаметром и геометрией пор. Контролируемое увеличение диаметра пор кремнеземов от 2.8 нм до 10 нм позволило впервые исследовать оптические свойства полимеров при переходе от изолированной полимерной цепи к пленке и определить возможности управляемого их изменения. Выявлено, что существенное влияние эффектов ограничения на исследуемые спектры являются результатом конкуренции двух типов взаимодействия: полимера с поверхностью пор и межмолекулярного взаимодействия между полимерными цепями. Впервые показано, что в результате конкуренции этих

взаимодействий возникают новые структуры полимеров в порах, которые не наблюдались в пленках и растворах полимеров. Доказано, что в ограниченном объеме нанопоры возникают три новые формы полимеров, имеющих гош-и транс-конформацию полимерных цепей, а также их агрегаты. Выявлено наличие двух термохромных переходов для наноразмерного ПДГС, которые существенно отличаются от переходов для пленки и раствора полимера.

Доказано существенное сокращение процессов релаксации люминесценции композитов и увеличения (в 1.5 раза) ее эффективности при комнатной температуре по сравнению с пленками полимеров вследствие эффектов ориентации и ограничения, что открывает широкие перспективы их применения в оптоэлектронных устройствах по сравнению с пленками полимеров.

Доказано существованием в полимере двух пространственно разделенных центров с различным распределением сегментов по длине и возникновению двух жидкокристаллических фаз в результате ориентации полимерных цепей.

Для исследования энергетического спектра ловушек в ПДГС мы использовали разработанный нами модифицированный метод фракционной термостимулированной люминесценции, который позволил значительно увеличить его энергетическое разрешение по сравнению с традиционным и получить корректные значения энергий активации ловушек. Впервые доказано, что большинство фракционных энергий ПДГС образуют систему горизонтальных полок в зависимости от температуры, что свидетельствует о дискретности энергетического спектра ловушек. Полученные результаты систематизированы на базе предложенной нами модели освобождения носителей с ловушек.

(англ.)

Technological methods and new nanocomposites made from semiconducting silicon-organic polymer poly(di-n-hexylsilane) PDHS and poly(methylphenylsilane) PMPS incorporated into nanoporous silicas with different pore diameter and geometry are developed. Controlled increase in silica pore diameter from 2.8 nm to 10 nm allows to investigate for the first time optical properties of polymers during transition from isolated polymer chain to polymer film and to establish possibilities of controlling this process. It's revealed that significant influence of confinement effects on the studied spectra is a result of competition between two types of interaction: the polymer to the pore surface and molecular interaction between polymer chains. For the first time it's shown that as a result of competition of these interactions formation of new polymer structures inside pores takes place, which is not observed in films and solutions. It is proved that three new polymer forms with gauche- and trans-conformation of polymer chains and their aggregates appear inside the confined volume of nanopore. The presence of two thermochromic transitions for nanosized PDHS is revealed which differ significantly from transitions in the polymer film and solution.

Significant reduction of luminescence relaxation processes in nanocomposites is confirmed and luminescence efficiency 1.5 times increases at room temperature compared to the efficiency for polymer films due to the effects of orientation and confinement inside nanopores, opening wider prospects for their use in optoelectronic devices compared to films of polymers.

Existence of two spatially separated centers with different distribution of segment length in the polymer, and emergence of two liquid crystal phases as result of orientation of polymer chains are shown.

Energy spectrum of traps in PDHS was studied by our new modified method of fractional thermal luminescence, which has significant increase in energy resolution compared with traditional methods and allows to obtain correct values of traps activation energy. For the first time it's proved that majority of PDHS fractional energies form a system of horizontal shelves depending on temperature, indicating discrete energy spectrum of traps. The results are systematized on the basis of our model of carriers release from traps.

4. Наявність охоронних документів на об'єкти права інтелектуальної власності.

Немає

5. Порівняння зі світовими аналогами.

Результати НДР відповідають світовому рівню. Всі результати роботи одержані вперше, мають універсальний характер і можуть бути використані при дослідженні і при розробках розупорядкованих конденсованих систем, наприклад, аморфних напівпровідників, стекол, розупорядкованих тонких плівок та гамма опромінених матеріалів. Вперше методами оптичної спектроскопії вивчені конформаційні зміни молекулярної структури плівок ПДГС, що виникають при їх нагріванні вище температури транс-гош фазового переходу з утворенням рідкокристалічної фази. Досліджено нові функціональні властивості полімерів, коли агрегація грає більш конструктивну ніж деструктивну роль. Розроблені технологічні методи виготовлення нових наноконкомпозитів.

Матеріали досліджень опубліковано в журналах, що входять до наукометричної БД Scopus.

6. Економічна привабливість для просування на ринок

Процеси локалізації та транспорту екситонів і носіїв заряду в органічних напівпровідниках є одним із основних процесів, на яких базується практична реалізація пристроїв молекулярної електроніки. Розроблені нами наноконкомпозити на основі кремній-органічних полімерів є новим функціональним матеріалом із суттєво покращеними параметрами в порівнянні з кремній-органічними полімерними плівками, які зараз використовуються в оптоелектроніці. Доведено суттєве скорочення процесів релаксації люмінесценції та зростання (в 1.5 рази) її ефективності при кімнатній температурі в порівнянні з плівками полімерів внаслідок ефектів орієнтації та обмеження в нанопорах, що відкриває ширшу перспективу їх застосування в оптоелектронних пристроях в порівнянні з плівками полімерів.

7. Потенційні користувачі (галузі, міністерства, підприємства, організації).

Науково-дослідницькі інститути НАНУ, вищі учбові заклади (НТУУ „КПІ”, м. Київ; Інститут фізики НАНУ; Інститут фізики напівпровідників НАНУ; Інститут хімії поверхні НАНУ; Інститут металофізики НАНУ); галузі застосування – фізика твердого тіла, фізика напівпровідників, оптоелектроніки, молекулярної електроніки та інш. Результати досліджень актуальні для практичної реалізації ряду пристроїв на основі органічних напівпровідникових матеріалів: органічні дисплеї, органічні світловипромінюючі діоди, тонкоплівкові польові транзистори, сонячні елементи та інш., спрямовані стимулювати розвиток молекулярної електроніки.

8. Стан готовності розробки.

Наукова повнота отриманих результатів відповідає вимогам для практичного застосування кремній-органічних полімерів в багатошарових електролюмінесцентних діодах в якості транспортних і світловипромінюючих шарів. Запропонована модель звільнення носіїв заряду з пасток може бути застосована до інших полімерів та інших розупорядкованих конденсованих систем з неперервним спектром пасток. Дослідження такого плану можуть дати цінну інформацію для оптимізації оптоелектронних приладів.

9. Існуючі результати впровадження.

Результати роботи впроваджені у нових розділах “Особливості транспорту носіїв заряду в нанорозмірних полімерах”, „Методики дослідження провідності та рухливості носіїв заряду”, „Взаємозв'язок між ступенем кристалічності полімерів і дискретним характером спектрів пасток для носіїв заряду” в лекційні курси “Сучасні технології у фізиці твердого тіла”, “Спеціальні розділи з експериментальної фізики”, “Сучасні питання фізики твердого тіла” для студентів ФМФ. За матеріалами роботи підготовлена до захисту кандидатська дисертація Керіти О.В. “Дослідження процесів локалізації і транспорту екситонів і носіїв заряду в плівках і наноконкомпозитах кремнійорганічних полімерів”

10. Форма участі інвестора

11. Обсяг інвестицій

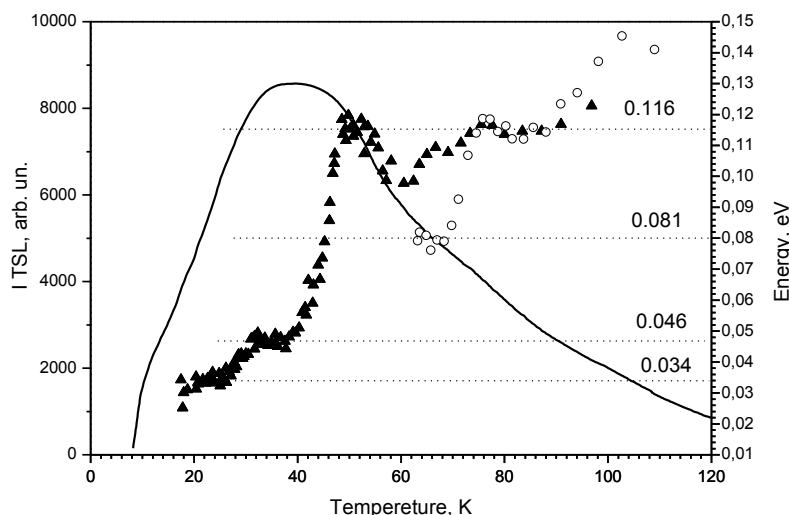
12. Мета інвестицій

13. Назва організації, телефон, E-mail

НТУУ "КПІ", фізико-математичний факультет, кафедра загальної фізики та фізики твердого тіла,

(044) 204-81-24, fmf@kpi.ua

14. Фото розробки



Термостимульована люмінесценція і фракційні енергії для чистого полімеру

15. Перелік публікацій за матеріалами досліджень за період виконання розробки

За матеріалами досліджень опубліковано 6 статей в журналах, що входять до наукометричної БД Scopus, зроблено 10 доповідей на міжнародних конференціях.

- 1. N. Ostapenko, D. Peckus, W. Gulbinas, S. Suto, A. Watanabe, «Distinctive optical properties of polysilane/ TiO₂ nanocomposite films», Ukr. J. Phys., 58 (2013) 208-213.
- 2. Luminescence features of nanocomposites of silicon-organic polymer/porous SiO₂ and TiO₂ films. N. Ostapenko, Yu. Ostapenko, O. Kerita, D. Peckus, V. Gulbinas, A. Eremenko, N. Smirnova, N. Surovtseva, Synthetic Metals, Synthetic Metals 187C (2014), 86-90.
- 3. Formation of the liquid-crystalline phase in poly (di-n-hexylsilane), N.I. Ostapenko, Y.V. Ostapenko, O. A. Kerita, Ukr. J. Phys., 59 (2014) 278-285.
- 4. V. Sugakov and N. Ostapenko, Effect of molecular optical vibrations on thermoluminescence of silicon organic polymer, Chem. Phys. 456 (2015) 22-27.
- 5. V. Sugakov, N. Ostapenko, Yu. Ostapenko, O. Kerita, V. Strelchuk, O. Kolomys, A. Watanabe, Interaction of optical vibration with charge traps and the thermoluminescence spectra of polymers, Ukr. J. Phys., 60 (2015)
- 6. Fluorescence relaxation kinetics of poly(methylphenylsilane) film and nanocomposites, N. Ostapenko, V. Gulbinas, R. Augulis, A. Boiko, M. Chursanova, A. Volkov, G. Telbiz, Nanoscale Research Letters (подано до друку).

16. Ключові слова

кремнійорганічні полімери, полі(ді-н-гексилсилан), полі(метилфенілсилан), нанокompозити, фракційна термостимульована люмінесценція, гош- та транс-конформація, енергії активації пасток, модель звільнення носіїв з пасток