

# Введение в органические полупроводники

## 1. Основные представления о молекулярных материалах и органических полупроводниках. Классификация органических полупроводников.

Сравнение органических и неорганических полупроводников. 1) Органические и неорганические кристаллы. 2) Органические и неорганические аморфные материалы.

Методы получения органических полупроводников. 1. Центрифугирование. 2. Вакуумное осаждение: А) термическое испарение. Б) молекулярно-лучевая эпитаксия. В) распыление 3. Осаждение из газовой фазы. 4. Электрохимические методы. 5. Струйная печать. 6. Золь-гель процесс. 7. Другие методики.

Преимущества и недостатки органических полупроводников.

Области применения органических полупроводников. Органическая электроника.

Классификация органических полупроводников. Два класса органических материалов:

А) органические материалы, состоящие из малых молекул Б) полимеры. Три основных типа органических полупроводников: А) молекулярные аморфные пленки. Б) молекулярные кристаллы. В) полимерные пленки. Виды полимеров: 1) хомополимеры, 2) кополимеры, 3) полимеры главной цепи, 4) полимеры с боковой цепью. Другие молекулярные материалы: фуллерены, нанотрубки, жидкие кристаллы.

## 2. Формирование молекулярных материалов. Электронная структура органических полупроводников

Формирование молекул из атомов. А) Атомные орбитали. Б) Связь атомов в молекулы. В) Пример-молекула водорода.

Образование связей в молекулах, содержащих углерод. Гибридизация связей. Перекрывание орбиталей. Атомные орбитали углерода и их гибридизация:  $sp^1$ ,  $sp^2$  и  $sp^3$  гибридизация.

От атомных орбиталей к молекулярным орбиталям. А) Сигма и пи связи. Б) Одинарные, двойные и тройные связи. В) Длина связей

Электронные состояния, соответствующие орбиталям. А) Заполнение молекулярных орбиталей. (Молекула  $C_2H_4$ ). Б) Двойные и одинарные связи. (Молекула  $C_4H_6$ ). В) Бензольное кольцо. Ароматические углеводороды полиацены.

От орбиталей молекулы к состояниям молекулы. Учет взаимодействия электронов. А) Формирование основного и возбужденного состояния методом LCAO (отсутствие взаимодействия электронов). Б) Одноэлектронное приближение (НОМО, LUMO). В) Разница между орбиталями и состояниями. Г) Синглетные и триплетные состояния.

От молекулы к молекулярному кристаллу. Зонная диаграмма молекулярного кристалла. Различное, используемое в литературе, представление орбиталей, структур и состояний. Кривая потенциальной энергии. Учет взаимодействия с ядрами атомов.

Энергетические переходы между молекулярными состояниями. Влияние колебаний ядер на энергетические состояния молекул. Полная волновая функция. Вопросы, связанные с колебаниями.

Излучательные переходы. Поглощение и излучение молекул. Электронный фактор. Колебательный фактор. Спиновый фактор.

## 3. Заряды и возбужденные состояния в органических полупроводниках.

Понятие об экситонах в случае молекулярных материалов. Экситоны Френкеля и Ванье.

Передача энергии: А) тривиальный механизм (излучательный), В) механизм Форстера, Декстера (безизлучательный). Переход Форстера (синглет). Перенос Декстера (триплет или синглет).

Диаграмма Яблонского.

Возбуждение носителей заряда в органических полупроводниках. 1) Генерация носителей заряда при диссоциации экситонов. «Спонтанная» или структурная диссоциация.

2) Генерация носителей заряда при высокоэнергетичном возбуждении. 3) Генерация носителей заряда при термическом процессе. 4) Генерация носителей заряда при инжекции. 5) Генерация носителей заряда при легировании.

Контакт между двумя органическими полупроводниками. Изменение заряда молекулы  
Разница между электрической и оптической зоной.

#### **4. Электронные и оптические процессы в органических полупроводниках**

Носители заряда в органических полупроводниках. Полярны, заряженные полярны.  
Биполярны и полярные кластеры.

Возможные механизмы переноса носителей заряда в молекулярных полупроводниках.  
Зонный транспорт. Прыжковый транспорт. Полярный транспорт (в кристалле).  
Транспорт, контролируемый беспорядком.

Плотность электронных состояний. Суперпозиция полярного эффекта и эффекта беспорядка. Эффекты захвата носителей заряда. Влияние морфологии материала на транспорт носителей заряда.

Рекомбинация носителей заряда в органических полупроводниках

#### **5. Органические полимеры**

Структура полимеров. Энергетические зоны полимеров. Несопряженные полимеры.  
Сопряженные полимеры.

Плотность электронных состояний в сопряженном полимере (полиацетилене).

Проводимость полимеров. Понятие о солитонах.

### **ЛИТЕРАТУРА**

- 1) A. Kϋhler, H. Bässler. **Electronic Processes in Organic Semiconductors**. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12, 69469 Weinheim, Germany. 2015.
- 2) Gert Strobl. **The Physics of Polymers. Concepts for Understanding** Their Structures and Behavior. Third Edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2007.
- 3) M.C. Petty. **Molecular Electronics**. From Principles to Practice. John Wiley & Sons Ltd. 2008.
- 4) Luís Alcácer. **Electronic Structure of Organic Semiconductors. Small Molecules and Polimers**. (Draft of October 5, 2014). Organic Electronics Group.  
<http://www.lx.it.pt/~alcacer/OrganicS.pdf>.
- 5) Ж.Симон, Ж.-Ж. Андре. **Молекулярные полупроводники**. Москва, «Мир», 1988.
- 6) М. Поуп, Ч. Свенберг. **Электронные процессы в органических кристаллах**. Т.1, 2, Москва, «Мир», 1985.
- 7) A. Moliton, R.C. Hiorns. **Review of electronic and optical properties of semiconducting  $\pi$ -conjugated polymers: applications in optoelectronics**. Polym Int 53:1397–1412 (2004)
- 8) Le T.-H., Kim Y., Yoon H. // Polymers. 2017. **9**, N. 12. P. 150