

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основы органической электроники

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Основы органической электроники**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь самостоятельно составлять план исследования Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	Знать фундаментальные основы органической электроники Знать терминологию, принципы, технологии и материалы, применяемые в органической электронике Знать современное состояние и перспективы развития органической электроники Уметь формулировать требования к материалам, используемым для создания органических электронных устройств, в зависимости от конкретной задачи Владеть методами моделирования и конструирования органических электронных устройств
СПК-4.С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	Знать основные физические модели, применимые для описания работы устройств органической электроники, и их ограничения Знать возможности и ограничения моделирования электронного транспорта методами квантовой химии Уметь описывать основные характеристики органических электронных устройств

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 32 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (14 часов занятия лекционного типа, 14 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 40 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать основы базовых дисциплин: "Аналитическая химия", "Органическая химия", "Физическая химия", "Химические основы биологических процессов", "Математический анализ", "Теория вероятностей", "Уравнения математической физики", "Механика/электричество", "Колебания и волны/Оптика", "Элементы строения вещества".

Уметь давать объяснения общеизвестным процессам и феноменам в физике и химии, использовать необходимые формулы и уравнения в рамках приближений.

Владеть общеизвестными экспериментальными методами и подходами в физической химии.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего

<p>Тема 1. Органическая электроника. Разнообразие устройств. Термин органическая электроника. История органических полупроводников. Исследования полиацетиленов. Plastic metals. Нобелевская премия по химии "for the discovery and development of conductive polymers". Основные типы полупроводниковых полимеров (меланины: полиацетилены, полифениленвинилены, полианилины, полифениленсульфиды, полипирролы, политиофены). Окисление полианилинов (лейкоэмеральдин, эмеральдин, пернигранилин). Композитные полупроводниковые полимеры (PEDOT:PSS). Узкощелевые полупроводниковые полимеры. Особенности полупроводниковых полимеров (преимущества и недостатки по сравнению с неорганическими полупроводниками), области их применения и типы электронных устройств на их основе.</p> <p>Тема 2. Терминология и природа проводимости в материалах. Термин органическая электроника. Природа электрического тока. Носители заряда. Плотность электрического тока. Дрейфовая скорость носителей заряда. Оценка дрейфовой скорости электронов в металлах. Подвижность носителей заряда. Зависимость подвижности носителей заряда от напряженности электрического поля. Удельное электрическое сопротивление и удельная электрическая проводимость. Концентрация носителей заряда. Сравнение в металлах и полупроводниках величин удельной проводимости, подвижности электронов</p>	14	3	3			6	8		8
---	----	---	---	--	--	---	---	--	---

<p>и концентрации подвижных электронов. Классификация проводниковых материалов. Зонное строение твердого тела и проводимость. Валентная зона и зона проводимости. Проводимость в металлах. Проводимость в полупроводниках и изоляторах. Уровень Ферми. Собственный и несобственный полупроводники. Температурная зависимость плотности носителей заряда от температуры для собственного и несобственного проводников.</p>									
<p>Тема 3. Особенности полупроводниковых материалов на органической основе. Преимущества и недостатки органических полимеров (разнообразие, пластичность, вес, дешевизна производства, массовое производство, технологии нанесения, биосовместимость, биodeградируемость, недолговечность, низкая эффективность и частота функционирования). Классы органических полупроводников. Сравнение физических свойств неорганических и органических полупроводников. Эффекты, связанные с большой шириной запрещенной зоны: медленные электронные процессы. Влияние на подвижность носителей зарядов фазовых переходов. Подходы к описанию транспорта заряда в органических полупроводниках. Анизотропия подвижности носителей зарядов в кристаллических ОПП. Влияние межмолекулярного взаимодействия и кристаллической упаковки на транспортные характеристики ОПП. Понятие локализованных состояний. Зонная, прыжковая и туннельная проводимость. Носители заряда в ОПП ("свободные" носители и поляроны). Пути</p>	16	3	3			6	10		10

<p>промотирования электронов (дырок) в зону проводимости (валентную зону), пути инжектирования/удаления электрона в зону проводимости (из валентной зоны): химический, оптический, электрический и термический путь.</p> <p>Тема 4. Полупроводниковые электронные устройства и их энергетические диаграммы. Двухполюсные и трехполюсные устройства. Резистор. Объемное и поверхностное удельное сопротивление. Особенности сопротивлений на основе органических полупроводников. Омический контакт металл-полупроводник. Энергетическая диаграмма контакта металл-полупроводник. Барьер Шоттки. Контактная разность потенциалов. Обедненная зона. Диод Шоттки. Тонкопленочные транзисторы. Вольтамперные характеристика. Характеристика управления. Подвижность носителей заряда для полевых транзисторов. Энергетическая диаграмма светодиода и фотовольтаической ячейки. Влияние локализованных состояний, работы выхода электрона металлов и различия в подвижности электронов и дырок на эффективность электролюминесценции. Оценка эффективности фотовольтаических ячеек на основе ВАХ (ток короткого замыкания, напряжение холостого хода, фактор заполнения, КПД). Основные процессы, происходящие с носителями зарядов в фотоячейках.</p>									
<p>Тема 5. Моделирование электронного транспорта. Нестационарная теория возмущений. Формула Ландау-Зинера. Теория электронного переноса Маркуса. Энергия реорганизации,</p>	23	5	5	1		11	12		12

<p>внутримолекулярная реорганизация и реорганизация поляризуемой среды, статическая и динамическая диэлектрическая проницаемость. Квантово-статистические модификации теории Маркуса: модели Левича-Догондзе и Биксона-Джортнера. Интеграл переноса, оценки интеграла переноса на основании расщепления энергий взаимодействующих граничных МО и их интегралов перекрытия. Квантово-химические подходы к расчету возбужденных состояний для оценок по теории Маркуса. Метод CDFT и CDFT-CI для моделирования возбужденных состояний с переносом заряда как псевдоосновных с условиями на зарядовое и спиновое распределение.</p> <p>Тема 6. Методы измерения подвижности носителей заряда. Времяпролетная (ToF) методика. Экстракция заряда при линейной развертке потенциала (Photo-CELIV). Радиационно-импульсная микроволновая электропроводность с временным разрешением Pulse Radiolysis Time-Resolved Microwave Conductibility Technique (PR-TRMC). Field-Induced TRMC Technique (FI-TRMC). Метод токов, ограниченных пространственным зарядом (ТОПЗ, Space Charge-Limited Current Technique SCLC). Подвижность, индуцированная полем эффектом. Импеданс (адмитанс) спектроскопия.</p> <p>Тема 7. Методы конструирования тонкопленочных устройств. Методы нанесения тонких пленок. Физические и химические методы. Химическое парофазное осаждение (метод CVD). Напыление конденсацией из газовой фазы (physical vapour deposition PVD). Вакуумное термическое</p>									
--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

<p>напыление. Ионно-плазменное напыление. Высокочастотное распыление. Магнетронное распыление. Электрохимическое осаждение. Методы нанесения из газовой и жидкой фаз. Химическое осаждение. Эпитаксия из газовой фазы. Молекулярно-пучковая эпитаксия. Жидкофазная эпитаксия. Паттернирование. Методы переноса тонких пленок.</p>									
<p>Тема 8. Тонкопленочные транзисторы и сенсоры. Архитектура тонкопленочных полевых транзисторов. Вольтамперные характеристика. Характеристика управления. Подвижность носителей заряда для полевых транзисторов. Тонкопленочные транзисторы на основе органических <i>p</i>-полупроводников (ацены, олигоарены, олиготиофены и полимеры). Тонкопленочные транзисторы на основе органических <i>n</i>-полупроводников (фуллерены и их производные, фталоцианины, нафталин- и перилендиимиды, олиготиофены и полимеры). Неорганические и органические диэлектрические материалы. Факторы, влияющие на диэлектрическую проницаемость.</p> <p>Тема 9. Фотовольтаические материалы: достижения и перспективы. Принцип функционирования фотовольтаической ячейки. Планарный гетеропереход. Максимальная эффективность работы однопереходного фотоэлемента (<i>предел Шокли-Квайссера</i>). Пути преодоления предела Ш.-К. Объемный гетеропереход. Оценка эффективности фотовольтаических ячеек на основе ВАХ (ток короткого замыкания, напряжение холостого хода,</p>	17	3	3	1		7	10		10

фактор заполнения, КПД). Основные процессы, происходящие с носителями зарядов в фотоячейках. Полимерные солнечные батареи. Солнечные батареи, сенсibilизированные красителем (ячейка Гретцеля). Гибридные перовскитные солнечные батареи.										
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	72	14	14	2		2	32	40		40

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и заданий для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Плотников Г. С., Зайцев В. Б. Микроэлектроника: основы молекулярной электроники. Учебное пособие для вузов, 2017.

Дополнительная литература

1. Z. Bao, J.J. Locklin, eds., Organic field-effect transistors, CRC Press, Boca Raton, 2007.
2. C. Wang, H. Dong, W. Hu, Y. Liu, D. Zhu, Semiconducting π -Conjugated Systems in Field-Effect Transistors: A Material Odyssey of Organic Electronics, Chem. Rev. 112 (2012) 2208–2267. doi:10.1021/cr100380z.
3. K.-J. Baeg, M. Binda, D. Natali, M. Caironi, Y.-Y. Noh, Organic Light Detectors: Photodiodes and Phototransistors, Adv. Mater. 25 (2013) 4267–4295. doi:10.1002/adma.201204979.
4. F. So, ed., Organic electronics: materials, processing, devices and applications, CRC Press, Boca Raton, FL, 2010.

5. F. Cicoira, C. Santato, eds., Organic electronics: emerging concepts and technologies, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2013.
6. P. Stallinga, Electrical characterization of organic electronic materials and devices, John Wiley & Sons, Chichester, U.K, 2009.
7. J. Kalinowski, Organic light-emitting diodes: Principles, characteristics, and processes, Marcel Dekker, New York, 2005.

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

1. в.н.с., д.х.н. Горюнков Алексей Анатольевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, aag@thermo.chem.msu.ru, тел. (495) 939-53-73
2. с.н.с., к.х.н. Луконина Наталья Сергеевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, nso@thermo.chem.msu.ru, тел. (495) 939-53-73
3. с.н.с., к.х.н. Броцман Виктор Андреевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, brotsman_va@mail.ru, тел. (495) 939-53-96
4. в.н.с., д.ф.-м.н. Иоффе Илья Нафтольевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ, ioffe@thermo.chem.msu.ru, тел. (495) 939-12-40

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета:

1. Термин органическая электроника. Преимущества органической электроники. Природа электрического тока. Носители заряда. Плотность электрического тока. Дрейфовая скорость носителей заряда. Оценка дрейфовой скорости электронов в металлах.
2. Подвижность носителей заряда. Зависимость подвижности носителей заряда от напряженности электрического поля. Удельное электрическое сопротивление и удельная электрическая проводимость. Концентрация носителей заряда. Сравнение в металлах и полупроводниках величин удельной проводимости, подвижности электронов и концентрации подвижных электронов.
3. Классификация проводниковых материалов. Зонное строение твердого тела. Валентная зона и зона проводимости. Проводимость в металлах. Проводимость в полупроводниках и изоляторах. Уровень Ферми.
4. Собственный и несобственный полупроводники. Температурная зависимость плотности носителей заряда для собственного и несобственного проводников.

5. Основные типы полупроводниковых полимеров. Особенности полупроводниковых полимеров, преимущества и недостатки по сравнению с неорганическими полупроводниками, области их применения и типы электронных устройств на их основе.
6. Классы органических полупроводников. Сравнение физических свойств неорганических и органических полупроводников. Эффекты, связанные с большой шириной запрещенной зоны.
7. Подходы к описанию транспорта заряда в органических полупроводниках. Анизотропия подвижности носителей зарядов в кристаллических ОПП. Влияние межмолекулярного взаимодействия и кристаллической упаковки на транспортные характеристики ОПП. Влияние на подвижность носителей зарядов фазовых переходов.
8. Носители заряда в ОПП. Понятие локализованных состояний. Зонная, прыжковая и туннельная проводимость. Пути промотирования электронов (дырок) в зону проводимости (валентную зону), пути инжектирования/удаления электрона в зону проводимости (из валентной зоны).
9. Двухполюсные и трехполюсные устройства. Резистор. Объемное и поверхностное удельное сопротивление. Особенности сопротивлений на основе органических полупроводников.
10. Омический контакт металл-полупроводник. Энергетическая диаграмма контакта металл-полупроводник. Барьер Шоттки. Контактная разность потенциалов. Обедненная зона. Диод Шоттки.
11. Энергетическая диаграмма светодиода и фотовольтаической ячейки. Влияние локализованных состояний, работы выхода электрона металлов и различия в подвижности электронов и дырок на эффективность электролюминесценции.
12. Оценка эффективности фотовольтаических ячеек на основе ВАХ (ток короткого замыкания, напряжение холостого хода, фактор заполнения, КПД). Основные процессы, происходящие с носителями зарядов в фотоячейках.
13. Нестационарная теория возмущений. Формула Ландау-Зинера. Теория электронного переноса Маркуса. Энергия реорганизации, внутримолекулярная реорганизация и реорганизация поляризуемой среды, статическая и динамическая диэлектрическая проницаемость.
14. Квантово-статистические модификации теории Маркуса: модели Левича-Догондзе и Биксона-Джортнера. Интеграл переноса, оценки интеграла переноса на основании расщепления энергий взаимодействующих граничных МО и их интегралов перекрывания.
15. Квантово-химические подходы к расчету возбужденных состояний для оценок по теории Маркуса. Метод CDFT и CDFT-CI для моделирования возбужденных состояний с переносом заряда как псевдоосновных с условиями на зарядовое и спиновое распределение.
16. Времяпролетная (ToF) методика. Экстракция заряда при линейной развертке потенциала (Photo-CELIV). Радиационно-импульсная микроволновая электропроводность с временным разрешением
17. Pulse Radiolysis Time-Resolved Microwave Conductivity Technique (PR-TRMC). Field-Induced TRMC Technique (FI-TRMC). Метод токов, ограниченных пространственным зарядом (ТОПЗ, Space Charge-Limited Current Technique SCLC). Подвижность, индуцированная полем эффектом. Импеданс (адмитанс) спектроскопия.
18. Физические и химические методы нанесения тонких пленок. Методы переноса тонких пленок.

19. Тонкопленочные полевые транзисторы: материалы, архитектура, принцип работы, современное состояние, перспективы. Подвижность носителей заряда для полевых транзисторов.
20. Тонкопленочные транзисторы на основе органических p-полупроводников. Тонкопленочные транзисторы на основе органических n-полупроводников. Неорганические и органические диэлектрические материалы. Факторы, влияющие на диэлектрическую проницаемость.
21. Планарный гетеропереход. Максимальная эффективность работы однопереходного фотоэлемента (предел Шокли-Квайссера). Пути преодоления предела Шокли-Квайссера. Объемный гетеропереход. Оценка эффективности фотовольтаических ячеек на основе ВАХ (ток короткого замыкания, напряжение холостого хода, фактор заполнения, КПД). Основные процессы, происходящие с носителями зарядов в фотоячейках.
22. Органические и гибридные солнечные элементы: материалы, структуры, современное состояние и перспективы. Полимерные солнечные батареи. Солнечные батареи, сенсibilизированные красителем (ячейка Гретцеля). Гибридные перовскитные солнечные батареи.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: фундаментальные основы органической электроники Знать: терминологию, принципы, технологии и материалы, применяемые в органической	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на

<p>электронике</p> <p>Знать: современное состояние и перспективы развития органической электроники</p> <p>Знать: основные физические модели, применимые для описания работы устройств органической электроники, и их ограничения</p> <p>Знать: возможности и ограничения моделирования электронного транспорта методами квантовой химии</p>	<p>зачете</p>
<p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: формулировать требования к материалам, используемым для создания органических электронных устройств, в зависимости от конкретной задачи</p> <p>Уметь: описывать основные характеристики органических электронных устройств</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: методами моделирования и конструирования органических электронных устройств</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>