

ИНСТИТУТ НАНОТЕХНОЛОГИЙ В ЭЛЕКТРОНИКЕ, СПИНТРОНИКЕ И ФОТОНИКЕ

КАФЕДРА ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

ОДОБРЕНО НТС ИНТЭЛ

Протокол № 2

от 26.04.2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ПЕРЕНОС И РЕКОМБИНАЦИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Направление подготовки
(специальность)

[1] 03.03.01 Прикладные математика и физика

Семестр	Трудоемкость, кред.	Общий объем курса, час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	В форме практической подготовки/В	СРС, час.	КСР, час.	Форма(ы) контроля, экс./зач./КР/КП
6	2	72	15	30	0		27	0	3
Итого	2	72	15	30	0	0	27	0	

АННОТАЦИЯ

В курсе излагаются основные современные теоретические представления о процессах переноса и рекомбинации носителей заряда в неупорядоченных органических материалах, методы математического моделирования данных процессов, основные экспериментальные результаты и описание основных экспериментальных методов, физические основы функционирования электронных приборов на основе органических материалов.

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины «Перенос и рекомбинация носителей заряда в органических материалах» являются:

Изучение основных теоретических концепций и понятий, овладение методами математического моделирования процессов переноса и рекомбинации носителей заряда в неупорядоченных органических материалах (полупроводниках и диэлектриках).

Знакомство с основными экспериментальными методами и результатами исследования переноса и рекомбинации.

Знание основных физических процессов, определяющих характеристики светодиодов, фотовольтаических элементов и других базовых элементов органической электроники.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП ВО

Для успешного усвоения данной дисциплины студент должен владеть математическим аппаратом, необходимым для решения дифференциальных уравнений, представлениями о физике атомов и молекул, физике твёрдого тела из курса общей физики, владеть понятийным аппаратом и методами решения задач теории электромагнитного поля, квантовой механики, статистической физики, физики полупроводников. Предполагается предварительное изучение следующих дисциплин:

Дифференциальные и интегральные уравнения

Общая физика (электричество и магнетизм)

Общая физика (атомная физика)

Теория поля

Квантовая механика

Теоретическая физика: статистическая физика

3. ФОРМИРУЕМЫЕ КОМПЕТЕНЦИИ И ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Универсальные и(или) общепрофессиональные компетенции:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
--------------------------------	--

Профессиональные компетенции в соответствии с задачами и объектами (областями знаний) профессиональной деятельности:

Задача профессиональной деятельности (ЗПД)	Объект или область знания	Код и наименование профессиональной компетенции; Основание (профессиональный стандарт-ПС, анализ опыта)	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
научно-исследовательский			
Выбор методов и подходов к решению поставленной научной проблемы, формулировка математической модели явления, аналитические и численные расчеты	Модели, методы и средства фундаментальных и прикладных исследований и разработок в области математики, физики и других естественных и социально - экономических наук по профилям предметной деятельности в науке, технике, технологиях, а также в сферах наукоемкого производства, управления и бизнеса	ПК-1 [1] - Способен проводить сбор, анализ научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011, 40.044, 40.104	З-ПК-1[1] - Знать способы сбора, анализа научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования. ; У-ПК-1[1] - Уметь синтезировать и анализировать научно-техническую информацию по тематике исследования. ; В-ПК-1[1] - Владеть навыками сбора, синтеза и анализа научно-технической информации, отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования.
Участие в проведении теоретических исследований, построении физических, математических и компьютерных моделей изучаемых процессов и явлений, в проведении аналитических исследований в предметной области по профилю специализации	Природные и социальные явления и процессы	ПК-2 [1] - Способен выбирать и применять необходимое оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.044	З-ПК-2[1] - Знать современное оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области. ; У-ПК-2[1] - Уметь критически оценивать, выбирать оборудования, инструментов и методов исследований в избранной предметной области ; В-ПК-2[1] - Владеть навыками выбора и применения

			оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области.
	инновационный		
Проведение фундаментальных и прикладных математических и физических исследований, направленных на решение инженерных, технических и информационных задач	Природные и социальные явления и процессы	ПК-5 [1] - Способен управлять программами освоения новой продукции и технологии, разрабатывать эффективную стратегию <i>Основание:</i> Профессиональный стандарт: 40.011, 40.034	3-ПК-5[1] - Знать основные методы и принципы управления программами освоения новой продукции и технологии, разрабатывать эффективную стратегию в сфере своей профессиональной деятельности. ; У-ПК-5[1] - Уметь находить оптимальные решения при освоения новой продукции и технологии, разрабатывать эффективную стратегию. ; В-ПК-5[1] - Владеть навыками нахождения оптимальных решений для освоения новой продукции и технологии, разрабатывать эффективную стратегию

4. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИСЦИПЛИНЫ

Направления/цели воспитания	Задачи воспитания (код)	Воспитательный потенциал дисциплин
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование чувства личной ответственности за научно-технологическое развитие России, за результаты исследований и их последствия (В17)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования чувства личной ответственности за достижение лидерства России в ведущих научно-технических секторах и фундаментальных исследованиях, обеспечивающих ее

		экономическое развитие и внешнюю безопасность, посредством контекстного обучения, обсуждения социальной и практической значимости результатов научных исследований и технологических разработок. 2.Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования социальной ответственности ученого за результаты исследований и их последствия, развития исследовательских качеств посредством выполнения учебно-исследовательских заданий, ориентированных на изучение и проверку научных фактов, критический анализ публикаций в профессиональной области, вовлечения в реальные междисциплинарные научно-исследовательские проекты.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование ответственности за профессиональный выбор, профессиональное развитие и профессиональные решения (B18)	Использование воспитательного потенциала дисциплин профессионального модуля для формирования у студентов ответственности за свое профессиональное развитие посредством выбора студентами индивидуальных образовательных траекторий, организации системы общения между всеми участниками образовательного процесса, в том числе с использованием новых информационных технологий.
Профессиональное воспитание	Создание условий, обеспечивающих, формирование научного мировоззрения, культуры поиска нестандартных научно-технических/практических решений, критического отношения к исследованиям лженаучного толка (B19)	1.Использование воспитательного потенциала дисциплин/практик «Научно-исследовательская работа», «Проектная практика», «Научный семинар» для: - формирования понимания основных принципов и способов научного познания мира, развития исследовательских качеств студентов посредством их вовлечения в исследовательские проекты по областям научных исследований. 2.Использование воспитательного потенциала

		дисциплин "История науки и инженерии", "Критическое мышление и основы научной коммуникации", "Введение в специальность", "Научно-исследовательская работа", "Научный семинар" для: - формирования способности отделять настоящие научные исследования от лженаучных посредством проведения со студентами занятий и регулярных бесед; - формирования критического мышления, умения рассматривать различные исследования с экспертной позиции посредством обсуждения со студентами современных исследований, исторических предпосылок появления тех или иных открытий и теорий.
--	--	---

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Разделы учебной дисциплины, их объем, сроки изучения и формы контроля:

№ п.п	Наименование раздела учебной дисциплины	Недели	Лекции/ Практ. (семинары) / Лабораторные работы, час.	Обязат. текущий контроль (форма*, неделя)	Максимальный балл за раздел**	Аттестация раздела (форма*, неделя)	Индикаторы освоения компетенции
	<i>6 Семестр</i>						
1	Основные понятия и экспериментальные результаты	1-8	8/16/0		25	КИ-8	З-ПК-2, У-ПК-2, В-ПК-2
2	Методы описания и практическое применение	9-15	7/14/0		25	КИ-15	З-ПК-1, У-ПК-1, В-ПК-1, З-ПК-

							2, У- ПК-2, В- ПК-2, 3-ПК- 5, У- ПК-5, В- ПК-5
	<i>Итого за 6 Семестр</i>		15/30/0		50		
	Контрольные мероприятия за 6 Семестр				50	3	3-ПК-1, В-ПК-1, 3-ПК-2, У-ПК-2, 3-ПК-5

* – сокращенное наименование формы контроля

** – сумма максимальных баллов должна быть равна 100 за семестр, включая зачет и (или) экзамен

Сокращение наименований форм текущего контроля и аттестации разделов:

Обозначение	Полное наименование
КИ	Контроль по итогам
З	Зачет

КАЛЕНДАРНЫЙ ПЛАН

Недели	Темы занятий / Содержание	Лек., час.	Пр./сем., час.	Лаб., час.
	<i>6 Семестр</i>	15	30	0
1-8	Основные понятия и экспериментальные результаты	8	16	0
1 - 4	Типы, особенности и основные электронные свойства органических материалов. Основные классы органических материалов, их значение в электронике. Отличительные особенности рассматриваемых материалов: структурный беспорядок, низкая собственная проводимость, прыжковый характер проводимости. Молекулярные состояния электронов. П- и σ- связи. Беспорядок и его природа в различных классах органических материалов. Локализованные и делокализованные состояния. Критерий Андерсона. Край подвижности и ловушки. Качественное рассмотрение	Всего аудиторных часов		
		4	8	0
		Онлайн		
		0	0	0

	спектра энергетических состояний электронов и дырок.			
5 - 8	Экспериментальные методы и основные результаты исследования переноса носителей заряда. Измерение времени пролёта. Нормальный и дисперсионный транспорт. Нестационарная радиационная электропроводность. Переходная электролюминесценция. Зависимость подвижности от температуры, напряжённости поля и концентрации носителей заряда.	Всего аудиторных часов		
		4	8	0
		Онлайн		
		0	0	0
9-15	Методы описания и практическое применение	7	14	0
9 - 12	Аналитические и численные методы описания прыжкового переноса носителей заряда. Примеры задач, решаемых методами теории протекания: задача сфер; переходы между ближайшими состояниями; моттовская проводимость с переменной длиной прыжка. Аналитические и численные методы определения транспортного уровня. Температурная зависимость транспортного уровня для экспоненциального и гауссова распределения прыжковых центров. Зависимость прыжковой проводимости от температуры и концентрации носителей. Алгоритм моделирования методом Монте- Карло. Метод численного решения уравнения баланса. Модель многократного захвата и освобождения.	Всего аудиторных часов		
		4	7	0
		Онлайн		
		0	0	0
13 - 15	Генерация и рекомбинация носителей в органических полупроводниках. Органическая электроника. Токи, ограниченные объёмным зарядом. Инжекция Фаулера- Нордгейма и Ричардсона-Шоттки. Фотогенерация и геминальная рекомбинация. Вычисление вероятности разделения геминальной пары в моделях Пула-Френкеля и Онзагера- Брауна. Вычисление константы бимолекулярной рекомбинации.	Всего аудиторных часов		
		3	7	0
		Онлайн		
		0	0	0

Сокращенные наименования онлайн опций:

Обозна чение	Полное наименование
ЭК	Электронный курс
ПМ	Полнотекстовый материал
ПЛ	Полнотекстовые лекции
ВМ	Видео-материалы
АМ	Аудио-материалы
Прз	Презентации
Т	Тесты
ЭСМ	Электронные справочные материалы
ИС	Интерактивный сайт

ТЕМЫ СЕМИНАРОВ

Недели	Темы занятий / Содержание
	<i>6 Семестр</i>
1 - 2	Типы, особенности и основные электронные свойства

	органических материалов. «Газовый» беспорядок и случай сохранения ближнего порядка. Вычисление распределения расстояний до ближайшего соседа. Вычисление энергии поляризации среды носителем. Связь энергетического и пространственного беспорядка. Оценка выполнения критерия Андерсона.
3 - 6	Экспериментальные методы и основные результаты исследования переноса носителей заряда Подвижность в квазиравновесном режиме. Аномальная дисперсия и её описание в приближении полевой диффузии. Теоретический анализ переходного тока в условиях времяпролётного эксперимента Энергетическая релаксация неравновесных носителей. Демаркационная энергия. Умеренно- и сильно-неравновесный (дисперсионный) транспорт. Аномальные характеристики подвижности и дисперсии носителей заряда. Примеры задач, решаемых методами теории протекания: задача сфер; переходы между ближайшими состояниями; моттовская проводимость с переменной длиной прыжка.
7 - 9	Аналитические и численные методы описания прыжкового переноса носителей заряда. Примеры задач, решаемых методами теории протекания: задача сфер; переходы между ближайшими состояниями; моттовская проводимость с переменной длиной прыжка. Аналитические и численные методы определения транспортного уровня. Температурная зависимость транспортного уровня для экспоненциального и гауссова распределения прыжковых центров. Зависимость прыжковой проводимости от температуры и концентрации носителей. Алгоритм моделирования методом Монте-Карло. Метод численного решения уравнения баланса. Модель многократного захвата и освобождения.
10 - 11	Генерация и рекомбинация носителей в органических полупроводниках. Органическая электроника. Токи, ограниченные объёмным зарядом. Инжекция Фаулера-Нордгейма и Ричардсона-Шоттки. Фотогенерация и геминальная рекомбинация. Вычисление вероятности разделения геминальной пары в моделях Пула-Френкеля и Онзагера-Брауна. Вычисление константы бимолекулярной рекомбинации.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации программы используются следующие технологии:

- лекции по курсу традиционного типа,

- самостоятельная работа студентов.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Фонд оценочных средств по дисциплине обеспечивает проверку освоения планируемых результатов обучения (компетенций и их индикаторов) посредством мероприятий текущего, рубежного и промежуточного контроля по дисциплине.

Связь между формируемыми компетенциями и формами контроля их освоения представлена в следующей таблице:

Компетенция	Индикаторы освоения	Аттестационное мероприятие (КП 1)
ПК-1	З-ПК-1	З, КИ-15
	У-ПК-1	КИ-15
	В-ПК-1	З, КИ-15
ПК-2	З-ПК-2	З, КИ-8, КИ-15
	У-ПК-2	З, КИ-8, КИ-15
	В-ПК-2	КИ-8, КИ-15
ПК-5	З-ПК-5	З, КИ-15
	У-ПК-5	КИ-15
	В-ПК-5	КИ-15

Шкалы оценки образовательных достижений

Шкала каждого контрольного мероприятия лежит в пределах от 0 до установленного максимального балла включительно. Итоговая аттестация по дисциплине оценивается по 100-балльной шкале и представляет собой сумму баллов, заработанных студентом при выполнении заданий в рамках текущего и промежуточного контроля.

Итоговая оценка выставляется в соответствии со следующей шкалой:

Сумма баллов	Оценка по 4-ех балльной шкале	Оценка ECTS	Требования к уровню освоению учебной дисциплины
90-100	5 – «отлично»	A	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, использует в ответе материал монографической литературы.
85-89	4 – «хорошо»	B	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твёрдо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
75-84		C	
70-74		D	
65-69	3 –	E	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает
60-64			

			неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала.
Ниже 60	2 – «неудовлетворительно»	F	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. ЭИ М37 Introduction to physics of second-order magnetic phase transitions : , Moscow: NRNU MEPhI, 2015
2. ЭИ К23 Molecular dynamics in multiscale modeling : textbook, Moscow: NRNU MEPhI, 2015
3. ЭИ Т82 Transport Processes in Macroscopically Disordered Media : From Mean Field Theory to Percolation, New York, NY: Springer New York, 2016
4. ЭИ С22 Введение в теорию переноса и физику защиты от ионизирующих излучений : учебного пособия для вузов, В. В. Болятко [и др.], Москва: НИЯУ МИФИ, 2013
5. ЭИ Н62 Нестационарные процессы переноса и рекомбинации носителей заряда в тонких слоях органических материалов : учебное пособие для вузов, В. Р. Никитенко, Москва: НИЯУ МИФИ, 2011

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. 538 Н62 Нестационарные процессы переноса и рекомбинации носителей заряда в тонких слоях органических материалов : учебное пособие, В. Р. Никитенко, Москва: НИЯУ МИФИ, 2011

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ:

1. справочник по ПО Wolfram Reaearch Mathematica 8
(reference.wolfram.com/mathematica/guide/Mathematica.html)

LMS И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ:

1. www.sciencedirect.com ()

2. www.aps.org ()

3. www.ufn.ru ()

<https://online.mephi.ru/>

<http://library.mephi.ru/>

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Специальное материально-техническое обеспечение не требуется

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ СТУДЕНТОВ

Курс включает в себя лекционные и практические занятия. Для успешного освоения курса полезно вспомнить некоторые темы из курса Квантовой механики и Физики полупроводников, в частности, основы зонной теории. На занятиях рассматриваются теоретические аспекты физики неупорядоченных органических полупроводников, а также решаются соответствующие задачи, в том числе и в интерактивной форме (обсуждение). Поощряется активное участие в обсуждении задач, а также умение своевременно задавать вопросы для прояснения всех непонятных моментов по пройденному материалу. Помимо лекционных и семинарских занятий курс включает в себя самостоятельную работу студентов. Данное время отводится для самостоятельной переработки и повторения материала, выполнения домашних заданий, устранения долгов, накопленных во время семестра, а также для самостоятельной подготовки к сдаче теоретического материала (экзамен). Во время самостоятельной подготовки к сдаче теоретического материала студенты учатся работать с научной литературой.

Итоговые баллы складываются из: 1) результатов тестового опроса и контрольной; 2) результатов контроля посещаемости; 3) результатов оценки работы студента в интерактивном режиме.

Получение положительной оценки по каждой проверочной работе (тестовый опрос и контрольная) является необходимым условием получения итоговой положительной оценки. В случае пропуска или получения отрицательной оценки самостоятельная работа должна быть переделана и сдана во время зачетной недели в конце семестра. Положительная оценка (аттестация) каждого раздела необходима для допуска к экзамену.

11. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРЕПОДАВАТЕЛЕЙ

Курс логически разбит на несколько взаимосвязанных частей. В первом разделе (1-8 недели) рассматриваются основные понятия и экспериментальные результаты, касающиеся общих свойств органических неупорядоченных материалов и устройств на их основе, во втором (9-16 недели) – описание физических процессов и характеристик органических фотовольтаических устройств.

При рассмотрении материала следует подчеркнуть:

Тема 1. Типы, особенности и основные электронные свойства органических материалов.

Характерные особенности беспорядка в сопряжённых полимерах, молекулярно-допированных полимерах, органических стёклах. Общие свойства рассматриваемых материалов: слабость межмолекулярного взаимодействия и, как следствие, локализация всех электронных (дырочных) состояний. Как следствие, прыжковый характер транспорта. Низкая концентрация собственных (равновесных) подвижных носителей заряда.

Тема 2. Экспериментальные методы и основные результаты исследования переноса носителей заряда.

Метод измерения времени пролёта, нестационарная радиационная электропроводность, метод CELIV. Температурная и полевая зависимость подвижности, аномальная дисперсия носителей заряда. Дисперсионный режим переноса при достаточно низких температурах.

Тема 3. Аналитические и численные методы описания прыжкового переноса носителей заряда.

Гауссова модель беспорядка. Концепция транспортного уровня и описание прыжкового транспорта на основе формализма модели многократного захвата.

Тема 4. Генерация и рекомбинация носителей в органических полупроводниках. Органическая электроника.

Образование молекулярных возбуждений (экситонов) как промежуточная стадия фотогенерации и рекомбинации носителей заряда. Вычисление вероятности разделения геминальной пары в моделях Пула-Френкеля и Онзагера-Брауна. Вычисление константы бимолекулярной рекомбинации. Многослойные тонкоплёночные органические гетероструктуры.

Тема 5. Преобразование солнечной энергии. Органические фотовольтаические устройства.

Энергоэффективность фотовольтаики, добротность. Отношение между структурой и свойствами. Принцип работы органического солнечного элемента. Переход Шоттки. Р-п переход. Объёмный гетеропереход.

Тема 6. Функциональные слои органического солнечного элемента.

Транспортный слой дырок – функция барьер для электронов у фотоанода. Транспортный слой электронов – барьер для дырок и фотокатода. Оптимальный фазовый состав объёмного гетероперехода.

Тема 7. Физика электронных процессов при поглощении света фотоактивными молекулами.

Спектроскопия электронного поглощения и фотолюминесценции. Спиновые состояния электронов и молекул, синглетные и триплетные состояния молекулы. Релаксация возбужденных экситонов. Состояние с переносом заряда в донорно-акцепторной системе. Рекомбинация связанной пары. Генерация свободных носителей заряда. Энергетические состояния верхней заполненной молекулярной орбитали (ВЗМО) и нижней свободной молекулярной орбитали (НСМО). Напряжение отрывной цепи и связь с ВЗМО и НСМО фотоактивных молекул.

Тема 8. Стабильность органических солнечных батарей. Продвинутые типы солнечных ячеек.

Проблема стабильности в органических солнечных ячейках. Наночастицы, плазмоника, обратная конверсия, мультиэкситонная генерация и тандемная технология для улучшения свойств органических солнечных ячеек.

Автор(ы):

Никитенко Владимир Роленович, д.ф.-м.н.

Саунина Анна Юрьевна