

РЕФЕРАТ

Отчет 51 с., 15 рис., 1 табл., 23 источн.

КОРРОЛЫ, ДЕПРОТОНИРОВАНИЕ, ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ, НАНОЧАСТИЦА, СТАТИСТИЧЕСКИЙ МЕТОД, ТАНТАЛ, ИОННО-АССИСТИРУЕМОЕ ОСАЖДЕНИЕ МЕТАЛЛОВ, ФОТОПРОВОДИМОСТЬ, ФТАЛОЦИАНИН СВИНЦА, МОЛИБДЕН, СМАЧИВАЕМОСТЬ, СВЧ-ИЗЛУЧЕНИЕ, ВОЛНОВОД, ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ВОЛНЫ, ЛАЗЕРНАЯ АБЛЯЦИЯ

Объекты исследования – свободные основания корролов и их депротонированные формы, кристаллические сферические наночастицы, слои на поверхности тантала, полученные при легировании ускоренными ионами переходных металлов, тонкие пленки фталоцианина свинца, пленки Мо на стекле, электронные параметры плоского полупроводникового образца, медьсодержащие наночастицы, возникающие при импульсной лазерной абляции мишени, погруженной в жидкость.

Цель работы – определить молекулярную геометрию NH-таутомеров свободного основания и депротонированной формы в основном синглетном S_0 состоянии, энергии верхних заполненных и нижних вакантных молекулярных орбиталей и электронные спектры поглощения. Проанализировать взаимосвязь величины энергетического зазора $\Delta E(S_1-T_1)$ и параметров, характеризующих молекулярную конформацию и электронную структуру макроцикла корролов. Изучить влияние размера сферических наночастиц на микро- и макроструктуру с учетом релаксации параметров кристаллической решетки. Исследовать морфологии и состава слоев, формируемых на поверхности тантала в процессе ионно-ассистированного осаждения переходных металлов. Используя метод циклической термодесорбции в сочетании с двухуровневой моделью прыжковой проводимости, произвести анализ температурных зависимостей проводимости и фотопроводимости пленок фталоцианина свинца, установить механизм влияния адсорбированного кислорода на процессы электропереноса и выявить вклад собственных и примесных центров локализации в проводимость и фотопроводимость этих пленок. Изучить морфологию поверхности исходных и модифицированных образцов и смачивание Мо-покрытия, осаждаемого на стеклянную подложку с использованием резонансного ионного источника вакуумной электродуговой плазмы. Разработать методику определения удельной электропроводности полупроводника из анализа частотной характеристики коэффициента пропускания в диапазоне частот 30-80 ГГц. Выяснить роли растворителя и параметров лазерного излучения на свойства генерируемых наночастиц.

Методы исследования – квантово-химические расчеты, люминесцентная спектроскопия, двухуровневый статистический метод описания неоднородных систем, основанный на одновременном использовании вариационного метода и модифицированного статистического метода условных распределений, сканирующая электронная микроскопия, рентгеновский энергодисперсионный микроанализ, спектрометрия резерфордовского обратного рассеяния быстрых ионов, измерение температурных зависимостей фотопрово-

димости на постоянном токе при циклической термодесорбции адсорбированных примесей, атомно-силовая микроскопия в контактном режиме (атомно-силовой микроскоп NT-206, зонды CSC21), смачивание дистиллированной водой определяли по равновесному краевому углу смачивания (РКУС), измерение коэффициента пропускания СВЧ-излучения, эмиссионная спектроскопия, просвечивающая и сканирующая микроскопия, рентгеноструктурный анализ.

Полученные результаты – исследованы спектрально-люминесцентные характеристики раствора 10-фенил-5,15-ди-(4,6-дихлоропиримидинил)-коррола при 77 К. Установлено, что в нижнем триплетном T_1 состоянии длинноволнового таутомера T_1 протекает эффективная NH-таутомеризация, в результате чего фосфоресценция наблюдается только для коротковолнового T_2 таутомера. Обнаружено, что при 77 К происходит смещение кислотно-основного равновесия и некоторая доля молекул депротонируется. Идентифицированы спектры флуоресценции и фосфоресценции депротонированной формы, при этом установлено, что энергетический зазор у депротонированной формы $\Delta E(S_1 - T_1) = 5570 \text{ см}^{-1}$ такой же большой, как и у свободных оснований. Методом функционала плотности оптимизирована молекулярная конформация NH-таутомеров серии королюв с различной архитектурой периферического замещения, рассчитаны их электронные спектры поглощения и величина энергетического зазора $\Delta E(S_1 - T_1)$. Установлено, что рост энергетического зазора $\Delta E(S_1 - T_1)$ обусловлен увеличением энергетической расстройки $\Delta E(\text{HOMO} - \text{HOMO} + 1)$, причем обнаруженная зависимость носит общий характер для всех типов исследованных молекулярных систем: двух NH-таутомеров свободного основания и депротонированной формы. Предложено, что такая тенденция является неотъемлемым свойством сокращенного макроцикла королюв, обладающего избыточной электронной плотностью по сравнению с порфином.

С помощью модифицированной компьютерной программы по определению профиля плотности кристаллических сферических наночастиц разных размеров в газовой среде с учетом пространственной релаксации параметров ГЦК решетки в объеме наночастицы рассчитаны равновесные поля плотности в межфазной области гетерогенной системы при температуре ниже тройной точки. Исследована адсорбция на кристаллических наночастицах с учетом изменения их микро- и макроструктуры.

Исследованы морфология и состав слоев, формируемых на поверхности тантала в процессе ионно-ассистированного осаждения переходных металлов из плазмы вакуумного дугового разряда в режиме, при котором в качестве ассистирующих процессу осаждения используются ионы осаждаемого металла. Установлено, что при ионно-ассистированном осаждении на поверхность тантала переходных металлов формируются повторяющие морфологию подложки многокомпонентные слои толщиной $\sim 50 \text{ нм}$, включающие атомы осажденных металлов, материала подложки, а также кислорода и углерода. Компоненты слоев распределены по поверхности практически рав-

номерно. Распределение элементов по толщине слоев зависит от геттерных свойств осаждаемых металлов.

Построена модель, описывающая влияние адсорбированного кислорода на процессы электропереноса в пленках фталоцианина свинца (PbPc) и установлен вклад собственных и примесных центров локализации в проводимость и фотопроводимость этих пленок.

Образцы Мо-покрытие/стекло, полученные при наличии ускоряющего потенциала, отличаются от пленок молибдена, нанесенных на стекло в безпотенциальном режиме тем, что сформированная в отсутствие потенциала поверхность пленки Мо обладает меньшей шероховатостью. Увеличение интегрального потока, асситируемых осаждение покрытия ионов, с $3,2 \cdot 10^{16}$ до $8,1 \cdot 10^{16} \text{ Mo}^+/\text{cm}^2$ приводит к росту степени гидрофильности поверхности в большей степени, чем в безпотенциальном режиме осаждения покрытия. Обнаружен рост степени гидрофильности поверхности с увеличением времени нанесения покрытия и соответственно толщины пленок молибдена. Достижение интегрального потока ионов величины $11,0 \cdot 10^{16} \text{ Mo}^+/\text{cm}^2$ приводит к тому, что поверхность системы Мо-покрытие/стекло становится гидрофобной и РКУС увеличивается до значения $\theta = 93,9^\circ$.

Предложена методика определения удельной электропроводности плоского полупроводникового образца по линейной области частотной характеристики коэффициента пропускания излучения миллиметрового диапазона.

Методом двухимпульсной ИЛАЖ твердотельных мишеней в различных жидкофазных средах без использования каких-либо поверхностно-активных веществ или стабилизаторов были получены НЧ меди (Cu) и ее оксида (CuO); исследованы структурные, морфологические и оптические характеристики сформированных НЧ. Показано, что составом и морфологией наночастиц можно управлять, варьируя состав и свойства мишени и жидкой среды, в которой осуществляется синтез.