

Projektowanie struktur opartych na materiałach funkcjonalnych do zastosowań w elektronice, optoelektronice i czujnikach gazów

Paulina Powroźnik

Instytut Fizyki CN-D, Politechnika Śląska, Konarskiego 22B, 44-100 Gliwice, Polska

e-mail: ppowroznik@polsl.pl

Postęp nauki w ostatnich dziesięcioleciach umożliwił wytwarzanie materiałów o grubości nanometrów. Takie nanowarstwy w urządzeniach (opto)elektronicznych (tj. tranzystorach, ogniwach słonecznych, czujnikach gazu lub biosensorach) są często łączone w wielowarstwowe struktury materiałów o różnych właściwościach. O skuteczności urządzenia decydują właściwości warstw składowych. Kluczową kwestią są procesy zachodzące na powierzchni i na styku materiałów lub między materiałem otaczającą atmosferą. Najważniejsze dla sprawności urządzeń elektronicznych są właściwości elektroniczne, chemiczne i morfologiczne materiałów. Dlatego przewidywanie tych właściwości i procesów fizykochemicznych zachodzących na powierzchniach granicznych jest kluczowe dla projektowania urządzeń opartych o struktury wielowarstwowe.

W dobie dużej mocy obliczeniowej otworzyły się nowe możliwości w materiałoznawstwie. Właściwości materiałów można przewidzieć przed przygotowaniem próbek fizycznych. Zastosowanie modelowania komputerowego badanych materiałów metodami chemii kwantowej może posłużyć do wstępnej selekcji najbardziej obiecujących struktur, ograniczając pomiary eksperymentalne do wąskiej grupy struktur o optymalnych właściwościach. W związku z tym zmniejsza się koszt i czas potrzebny do scharakteryzowania nowych struktur, a co za tym idzie poprawia się efektywność badań.

W przedstawionej pracy pokazano możliwości zastosowania nowej metodologii opartej na modelowaniu teoretycznym poprzedzającym badania doświadczalnej w celu zrozumienia procesów fizykochemicznych zachodzących na powierzchni i interfazach w strukturach do zastosowań w urządzeniach elektronicznych. Jako przykład przedstawiono modelowanie oddziaływania sarinu i związku symulującego sarin, metylofosfonianu dimetylu (DMMP) z metalo-ftalocyjaninami (MPcs), potwierdzone wynikami eksperymentalnymi [1]. Wyniki tych badań dostarczyły kluczowych informacji dla zaprojektowania czujnika sarinu. Oprócz wyników modelowania czujników sarinu omówiono szersze możliwości wykorzystania nowej metodologii projektowania struktur dla urządzeń elektronicznych.

Ref:

[1] H. Aldahhak, P. Powroźnik, P. Pander, W. Jakubik, F. B. Dias, W. G. Schmidt, U. Gerstmann, M. Krzywiecki, J. Phys. Chem. C 124 (2020) 6090–6102.