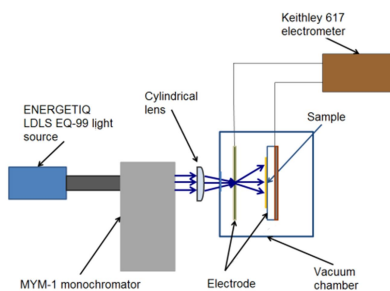


Robežvirsmas starp divām organiskajām vielām pētīšana ar fotoemisijas kvantu iznākuma spektroskopijas metodi

Raitis Gržibovskis

No organiskiem materiāliem veidotas ierīces (organiskās Saules baterijas, organiskās gaismu emitējošās diodes (*organic light emitting diode*- OLED)) bieži vien sastāv no vairākiem slāņiem- elektrodziem, starp kuriem atrodas viens vai vairāki aktīvo vielu slāņi. Šo ierīču efektivitāti noteiks ne tikai katra atsevišķā slāņa efektivitāte, bet arī šo slāņu savstarpējā saderība, piem., elektronu pārnese starp organisko vielu un elektrodu vai starp divām organiskajām vielām. Līdz šim aktīvi ir pētīti procesi metāls/organiskā viela robežvirsmā, bet robežvirsmā starp divām organiskajām vielām ir pievērstā maza uzmanība.

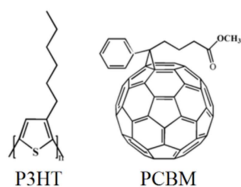
Viens no rādītājiem, kas raksturo dažādu materiālu mijiedarbību ir šo materiālu enerģētisko līmeņu (jonizācijas enerģija, elektronu afinitāte) nobīde robežvirsmu tuvumā. Līdz šim šādu pētījumu veikšanai visbiežāk tiek izmantota ultravioletā fotoelektronu spektroskopija (*ultraviolet photoelectron spectroscopy*- UPS), kuras metode balstās uz elektronu skaita sadalījumu pēc to kinētiskās enerģijas. Kaut arī metode tiek bieži pielietota, tai ir savi trūkumi, piem., mērījumus iespējams veikt tikai ultraaugstā vakuumā, kā arī paraugi tiek iegūti ar termisko iztvaicēšanu vakuumā, kas ierobežo to vielu klāstu, kas var tik pētītas. Eksistē arī alternatīva metode- fotoemisijas kvantu iznākuma spektroskopija (*photoemission yield spectroscopy*- PYS). Shēmu skatīt 1.attēlā. Iekārta sastāv no gaismas avota, monohromatora, vakuuma kameras, kurā atrodas paraugs un elektronus noķerošais elektrods, un elektrometra.



1.att. Fotoemisijas kvantu iznākuma spektroskopijas iekārtas shēma

Metodes būtība ir vienkārša- ar noteikta viļņa garuma ultravioleto (UV) starojumu tiek apstarots paraugs. Tiek reģistrēta izrauto elektronu skaita atkarība no viļņa garuma. Nosakot viļņa garumu, pie kura parādās signāls, iegūstam meklēto jonizācijas enerģijas vērtību.

Šajā projektā tika pētīta robežvirsmas starp divām Saules bateriju veidošanā plaši pazīstamām vielām- poimēru P3HT un fullerēna atvasinājumu PCBM. Vielu struktūrformulas parādītas 2.attēlā.

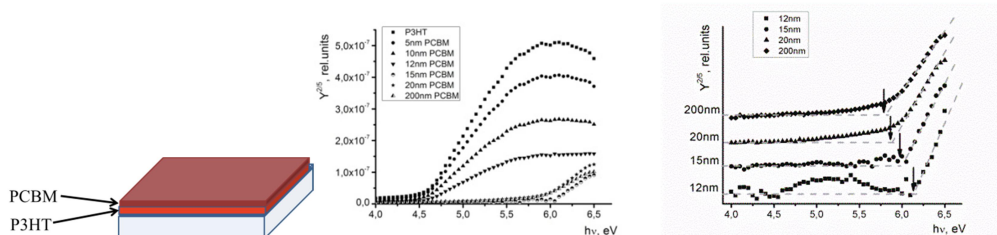


2.att. Pētīto vielu struktūrformula

P3HT-PCBM sistēma izvēlēta tāpēc, ka šīs divas vielas ir plaši pētītas, kas pēc citiem darbiem ļauj novērtēt mūsu rezultātu ticamību, kā arī šīs vielas ir komerciāli iegādājamas un to īpašības ir skaidri zināmas.

Pētījums iedalāms divās daļās- plakanas robežvirsmas paraugu pētījums un tilpuma paraugi.

Plakanas robežvirsmas gadījumā uz stikla, kas pārklāts ar ITO, ar rotējošā diska metodi no hloroforma šķīduma tika uznešts aptuveni 300nm biezs polimēra slānis. Pēc tam ar termisko iztvaicēšanu vakuumā uz šīs kārtiņas tika uznešts PCBM slānis. Tika uzņemti fotoemisijas spektri atkarībā no PCBM slāņa biezuma (skatīt 3.attēlu).

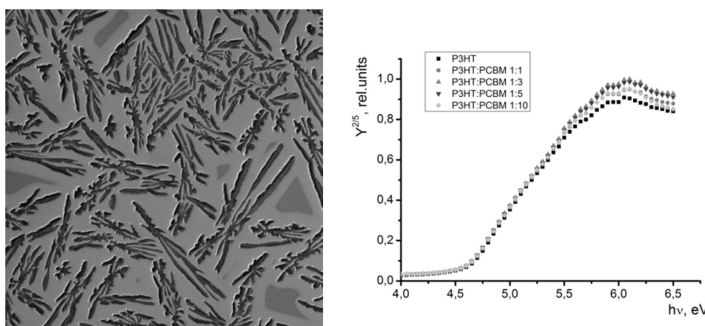


3.att. Parauga shēma, P3HT/PCBM paraugu fotoemisijas spektri atkarībā no PCBM slāņa biezuma, PCBM fotoemisijas spektri atkarībā no slāņa biezuma.

Ir redzams, ka palielinoties PCBM slāņa biezumam, P3HT radītā signāla ietekme samazinās, līdz pie 15nm biezas PCBM kārtiņas, polimēra signāls vairs nav redzams. Tas nozīmē, ka šīs metodes skenēšanas dziļums ir ~12-15nm. Tas ir 5 reizes vairāk, nekā UPS mērījumos, kur skenēšanas dziļums ir tikai ~2-3nm. Šī ir vēlviens fotoemisijas kvantu iznākuma spektroskopijas priekšrocība pār UPS. Tika arī novērota PCBM jonizācijas enerģijas nobīde atkarībā no slāņa biezuma.

Tilpuma paraugi arī iedalāmi divās daļās- sērija, kurā P3HT :PCBM paraugi iegūti no hlorbenzola šķīduma, un sērija, kurā paraugi iegūti no hloroforma šķīduma. Šajos paraugos mainīta masas attiecība starp P3HT un PCBM (1:0 (tīra P3HT kārtiņa), 1:1, 1:3, 1:5 un 1:10).

Hlorbenzola viršanas temperatūra ir 180°C. Lēnā šķīdinātāja iztvaikošana pieļauj P3HT un PCBM kristalizēšanos. Rezultātā pie P3HT:PCBM masu attiecības 1:10 iegūti lieli, sazaroti PCBM kristalīti uz parauga virsmas (4.attēls).

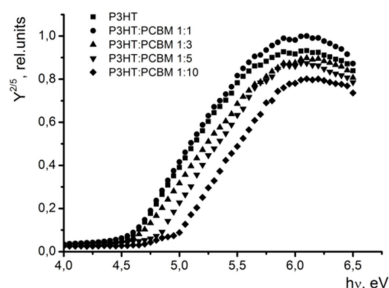


4.att. P3HT:PCBM (1:10) virsmas attēls iegūts ar skenējošo elektronu mikroskopu (SEM), fotoemisijas spektri atkarībā no P3HT:PCBM masu attiecības.

Šajā gadījumā nekādas spektrālas izmaiņas atkarībā no P3HT:PCBM masu attiecības netika novērotas. Vēl vairāk- iegūtie spektri sakrīt ar tīras P3HT kārtiņas spektru. Tas nozīmē, ka PCBM kristalīti uz parauga virsmas ir “caurspīdīgi” vai “neredzami” šai metodei. Šajā gadījumā relatīvi mazs P3HT molekulu skaits atrodas

robežvirsmas ar fullerēna molekulām. Lai novērotu kādus robežvirsmu efektus, mums ir jāpalielina šis skaits.

Hloroforms iztvaiko daudz straujāk un iegūtajās kārtiņās polimērs un PCBM ir homogēni sadalīti parauga tilpumā. Šajā gadījumā var pieņemt, ka gandrīz visas molekulas atrodas saskarē ar “svešām” molekulām, līdz ar to robežvirsmu efektiem būtu jābūt vairāk izteiktiem.



5.att. Fotoemisijas spektrs no hloroforma veidotiem P3HT:PCBM paraugiem

5.attēlā redzama P3HT jonizācijas enerģijas nobīde no 4,55eV uz 4,90eV, palielinoties PCBM koncentrācijai paraugā.

Šajā darbā esam parādījuši, ka fotoemisijas kvantu iznākuma metode ir pielietojama divu organisku savienojumu robežvirsmas un tās ietekmes uz savienojumu jonizācijas enerģiju pētīšanai. Tomēr enerģijas līmeņu nobīdes novērošanai ir nepieciešams nodrošināt pēc iespējas lielāku skaitu ar molekulām, kas atrodas uz šīs robežvirsmas.