

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра радиотехники и электродинамики

наименование кафедры

ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПОЛИЭТИЛЕНА И ПОЛИАЦЕТИЛЕНА

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента (ки) 4 курса 423 группы

направления 11.03.03 «Конструирование и технология электронных
средств»

код и наименование направления

физического факультета

наименование факультета

Двойневой Анны Алексеевны

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

проф., д. ф.-м. н., доц.
должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

Г.Н. Тен
инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

д.ф.-м.н., профессор
должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О.Е. Глухова
инициалы, фамилия

Саратов 2019 г.

Введение.

Полимерные материалы всегда связывали с революционными преобразованиями в науке и технике. Полимеры уже давно и успешно заменяют традиционные изоляционные материалы.

Многообразие полимерных композиций и возможность получать на их основе материалы с широким диапазоном физико-химических свойств привели к успешному использованию их в микроэлектронике и радиотехнике в качестве конструкционного материала.

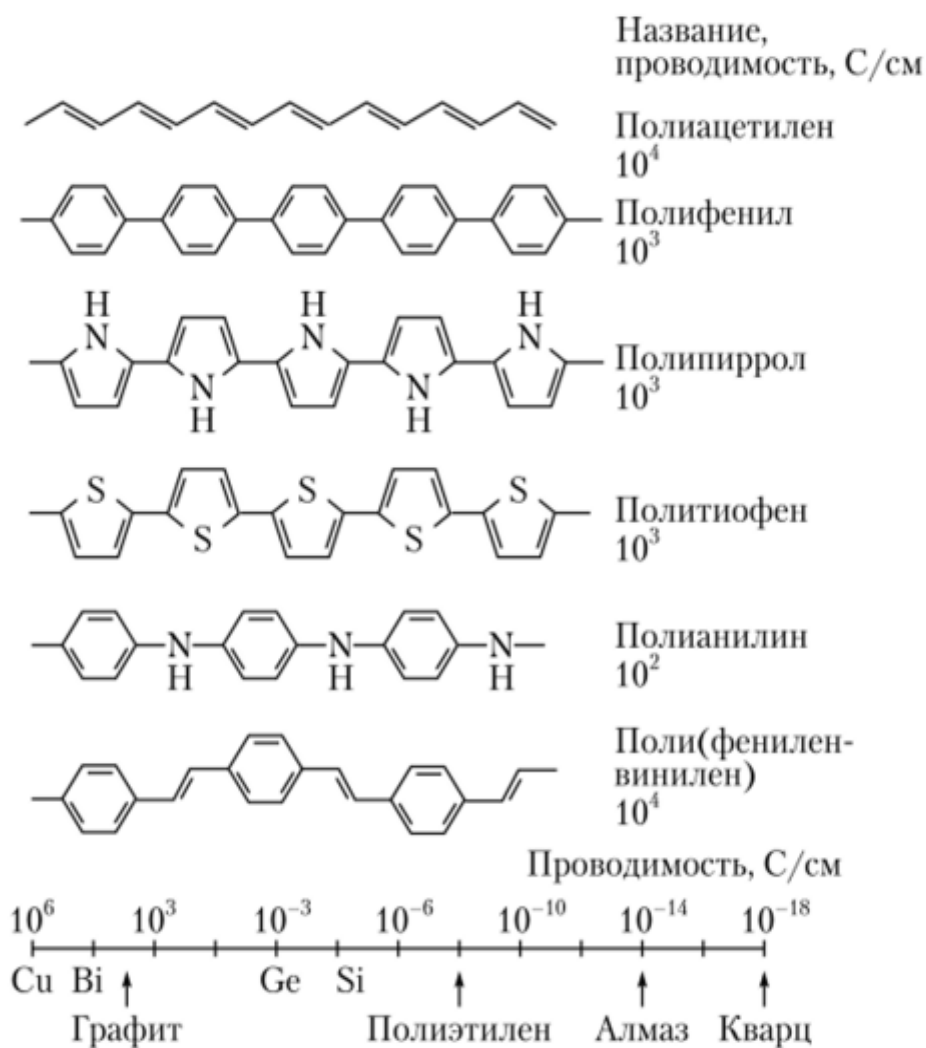
В настоящее время интенсивно ведутся поиски модифицированных полимеров со свойствами проводимости. Успех этих исследований может привести к революционному преобразованию технологии основных компонентов электронной техники.

На рис. ниже приведены примеры полимеров и значение их проводимость.

Классическим примером полимера, широко используемого в «полимерной» электронике, является полиацетилен.

Его электропроводность можно менять в широком диапазоне, например, в процессе синтеза за счёт изменения длины полимерных цепей.

Свойства любой молекулярной структуры отражены в его электронном строении и проявляются в электронных спектрах.



Цель данной работы – выполнить расчёт электронного спектра полиэтилена и полиацетилена.

Для этого необходимо решить следующие **задачи**:

1. Предложить новый способ расчёта электронного спектра полиэтилена за счёт увеличения длины элементарного звена полимера
2. Выполнить расчёты электронных спектров полиэтилена и полиацетилена
3. Сравнить результаты расчётов с экспериментальными спектрами

Работа состоит из трех разделов.

Первый раздел посвящён изучению электронных приборов на основе полимерных материалов. Уже в 60-е годы были получены полимеры с высокой электропроводимостью, псевдометаллическими и полупроводниковыми свойствами. Полиацетилен является классическим примером полимера данного класса. Его электропроводимость можно менять в широком диапазоне, как в процессе синтеза (путем контроля длины полимерных цепей), так и при полевых воздействиях (тепловом, электромагнитном, ионизирующим излучением), благодаря полисопряженным химическим связям, что приводит к соответствующему изменению либо первичной структуры полимера (структурная перестройка), либо к изменению степени его полимеризации.

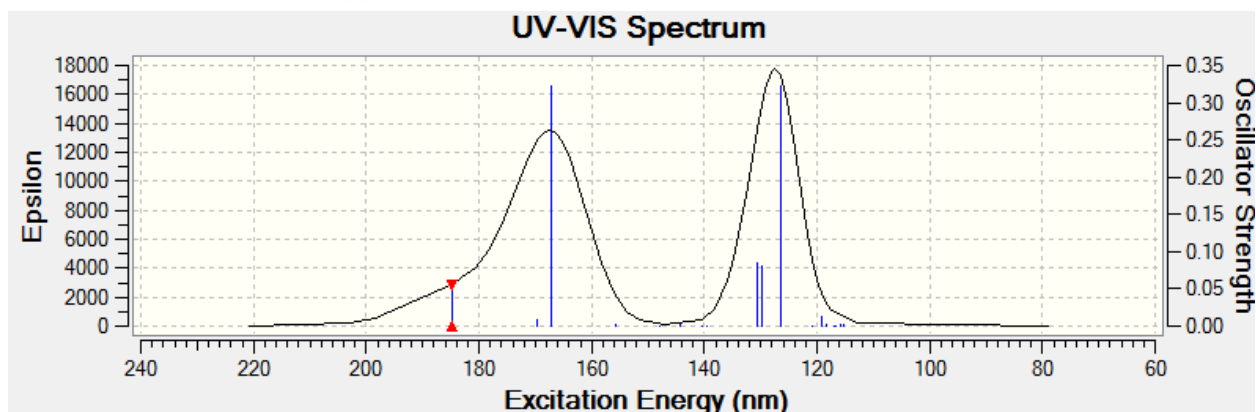
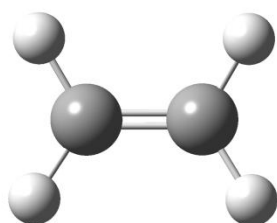
Изменяя первичную структуру полимера, можно задавать уровни молекулярных орбиталей и, следовательно, ширину его запрещенной зоны. Продолжая рассмотрение аналогий, можно заметить, что в качестве межсоединений можно использовать системы линейных полимеров с сопряженными связями.

Во втором разделе были изучены физические и химические свойства полимеров. Физические свойства полимеров зависят от их химических составов (углеводород, сложный эфир, галогенид, лактам и др.), также влияет молярная масса и строение макромолекул. Полимеры делят на линейные и разветвленные гомо-(I), со-(II) или тройные (III) полимеры, блок-сополимеры (IV), привитые сополимеры (V) и сополимеры сетчатой структуры (VI). Молекулярные цепи способны принимать в пространстве огромное число изогнутых конфигураций за счет возможности поворотов элементов цепи вокруг ординарных связей, благодаря чему представляют собой свернутые клубки, которые непрерывно флюктуируют, переходя из одной конфигурации в другую.

Большинство полимеров относится к диэлектрикам. Однако их диэлектрические свойства лежат в широких пределах и зависят от состава и структуры макромолекул. Диэлектрические свойства в значительной степени определяются наличием, характером и концентрацией полярных групп в макромолекулах.

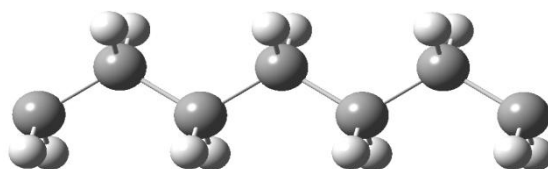
В третьем разделе приведен расчет электронного спектра полиэтилена. Простейшей структурной моделью полимерного звена может служить фрагмент на основе этилена, в которой разрываются двойные связи и возникают две ненасыщенные валентности. Спектр молекулы этилена состоит из двух полос поглощений в области дальнего УФ с максимумами ~164 и ~123 нм.

На рисунке приведена молекулярная структура и электронный спектр этилена.

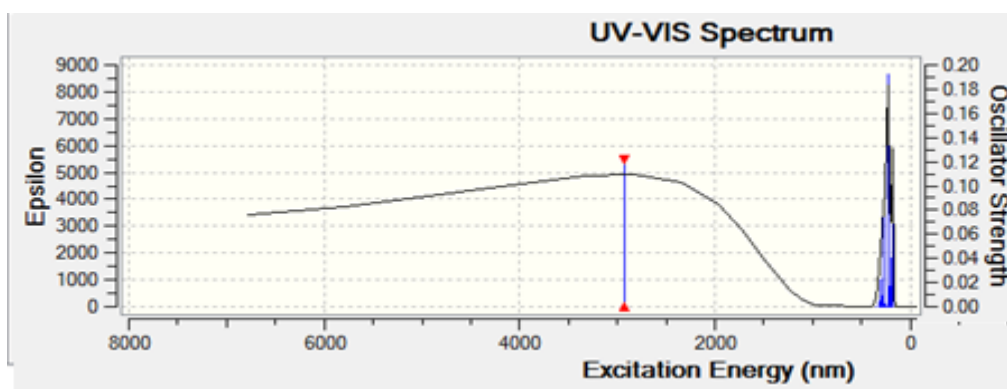


Электронный спектр поглощения этилена

Далее был предложен следующий подход для расчёта электронного спектра поглощения полимера этилена. В качестве полимерного звена была взята не молекулярная структура – $\text{CH}_2\text{--CH}_2\text{--}$, а полимерная единица А.



Электронный спектр полимерной единицы А имеет совершенно другой вид. В нём проявляется широкая, сильная по интенсивности полоса поглощения в области ближнего УФ и две полосы поглощения слабой интенсивности в области 400-200 нм, что согласуется с экспериментальным спектром.



Закключение

Таким образом, в результате проведённых исследований был рассмотрен классический способ расчёта электронного спектра полиэтилена, при котором увеличивается длина полимерной цепочки. Такой способ расчёта является очень длительным и требует учёта краевых эффектов. Был предложен новый способ расчёта электронного спектра полиэтилена за счёт увеличения длины простейшего звена полимера.

Как показало сравнение с экспериментом, длину элементарного звена необходимо выбирать с учётом массы полимера, температуры и др. условий.

Список литературы

1. В.Мартынов, статья «Электроника будущего»//журнал «Электроника НБТ», выпуск №1, 2002 год.
2. Журнал «Laser Focus World», 2001 год, Т.37, выпуск №3, стр. 41–44.
3. Журнал «Semiconductor International», 2000 год, Т.23, выпуск №8, стр.46.
4. Журнал «Semiconductor International», 2001 год , Т.24, выпуск №6, стр.50.
5. Журнал «Semiconductor International», 2001 год, Т.24, выпуск №8, стр.40.
6. Журнал «Solid State Technology», 2000 год, Т.43, выпуск №3, стр. 63–77.
7. Журнал «Photonics Spectra», 2000 год, Т.34, выпуск №5, стр.44.
8. Журнал «Journal of American Chemical Society», 2000 год, Т.122, выпуск №2, стр. 339–347.
9. Журнал «Зарубежная электронная техника», 2000 год, выпуск №1, с. 66–72.
10. А. И. Романенко «Электронные транспортные свойства электропроводящих полимеров и композитов на их основе», 2013 год.
11. Бартенев Г. М., Зеленев Ю. В. Другие авторы: Френкель С. Я. (редактор) «Курс физики полимеров - учебное пособие для студентов химико-технологических специальностей вузов», Ленинград: Химия, 1976 год.
12. А. Н. Алешин «Солнечные элементы на основе полимерных и композитных (органиканеорганика) материалов» //Журнал «Инновации» № 7, стр.165, 2012 год.
13. Мингулина Э.И., Масленникова Г.Н., Коровин Н.В., Филиппов Э.Л. «Курс общей химии» 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Высш. шк., 1990 год, стр. 446: ил. МЭИ, 1990 под редакцией Коровина

14. В. Ф. Марков, Х. Н. Мухамедзянов, Л. Н. Маскаева, «Материалы современной электроники», Екатеринбург Издательство Уральского университета, 2014 год
15. А.В. Ванников «Органические полимерные светоизлучающие устройства»
16. В.Б. Оджаев, «Физика электропроводящих полимеров» (курс лекций), Минск, 2017 год.
17. Штиллер В. «Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика» — М.: Мир, стр. 176, 2000 год.
18. Ванников А.В., Гришина А.Д., Новиков С.В. «Успехи химии», Т. 63, выпуск № 2, стр. 103-123, 1992 год.
19. В.С.Лаврус. «Источники энергии» , 1997 год.
20. Виноградова С. В., Васнев В. А. «Поликонденсационные процессы и полимеры» : М.: МАИК «Наука/Интерпериодика»,стр. 372, 2000 год.
21. А.Л. Волынский, «Как смешать полимеры?» // Природа. — 2014 год, выпуск № 3, стр. 44–52.
22. Коршак В. В., Виноградова С. В. «Равновесная поликонденсация», М.: Наука, 1968 год.
23. Коршак В. В., Виноградова С. В. «Неравновесная поликонденсация», М.: Наука, 1972 год.
24. Кривошей В. Н. «Тара из полимерных материалов», М., 1990 год.
25. Махлис Ф. А. Федюкин Д. Л., «Терминологический справочник по резине», М., 1989 год.
26. Тагер А. А. «Физико-химия полимеров», М.: Научный мир, 2007 год.
27. Шефтель В. О. «Вредные вещества в пластмассах», М., 1991 год.
28. «Энциклопедии полимеров», Т. 1 - 3, гл. ред. В. А. Каргин, М., 1972—1977 года.

29. http://ens.tpu.ru/POSOBIE_FIS_KUSN/%D1%8D%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%82%D1%80%D0%BE%D0%BC%D0%B0%D0%B3%D0%BD%D0%B5%D1%82%D0%B8%D0%B7%D0%BC/02-10.htm

30. <https://chem21.info/info/385290/>