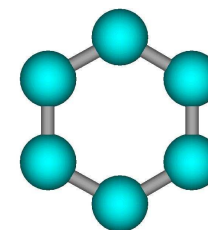


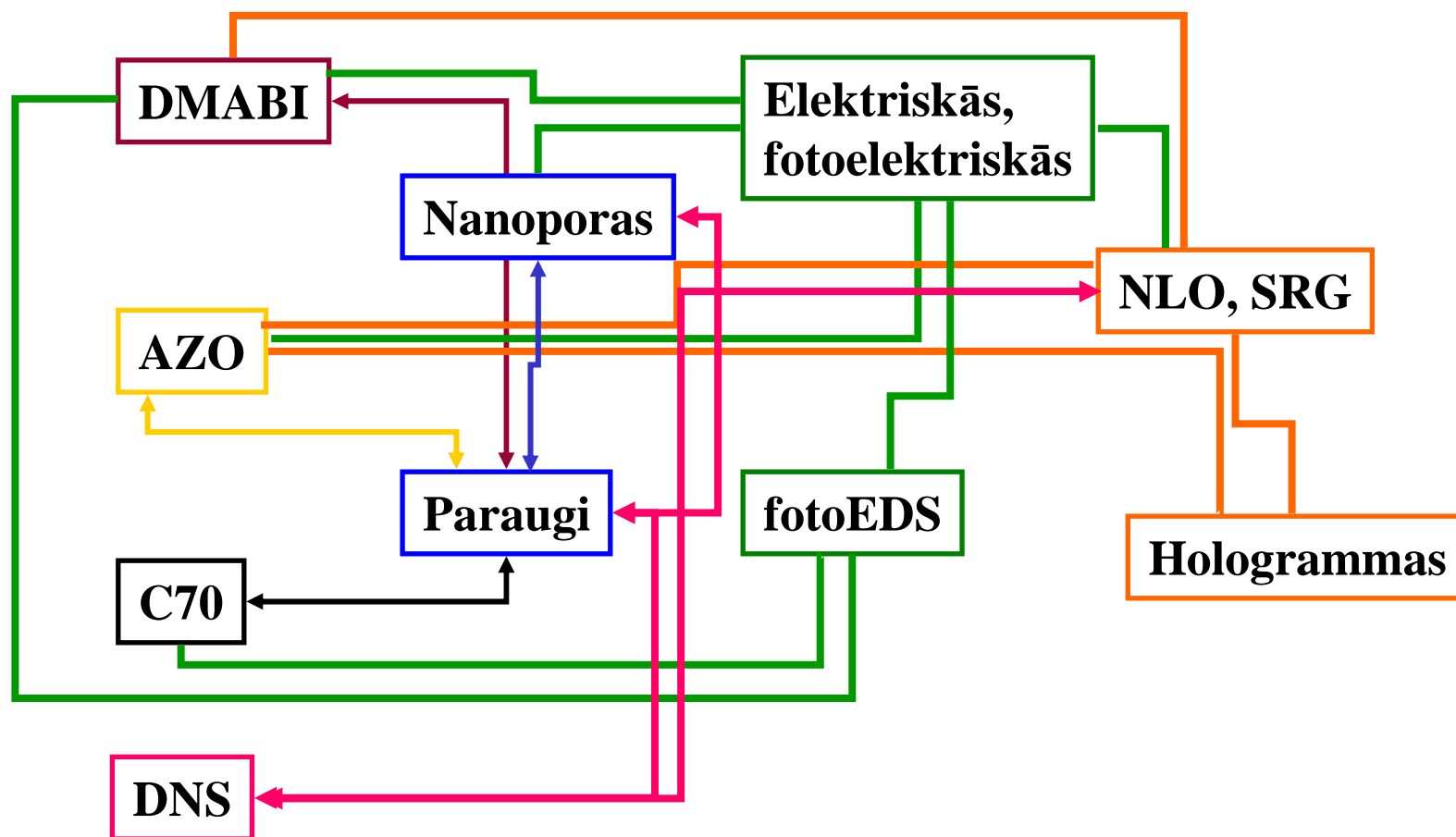
# Projekts Nr. 3

## Materiāli fotonikai un nanoelektronikai balstīti uz jauniem funkcionāliem zemmolekulāriem un augstmolekulāriem organiskiem savienojumiem



Galvenie izpildītāji:

Dr.chem. Donāts Erts	LU KFI
Dr.phys. Egils Fonavs	LU CFI
Dr.phys. Jānis Kalnačs	FEI
Dr.habil.chem. Valdis Kampars	RTU LKI
Dr.phys. Igors Kaulačs	FEI
Dr.chem. Elga Markava	LOSI
Dr.habil.phys. Inta Muzikante	LU CFI
Dr.habil.phys. Andris Ozols	RTU TFI
Dr.phys. Mārtiņš Rutkis	LU CFI

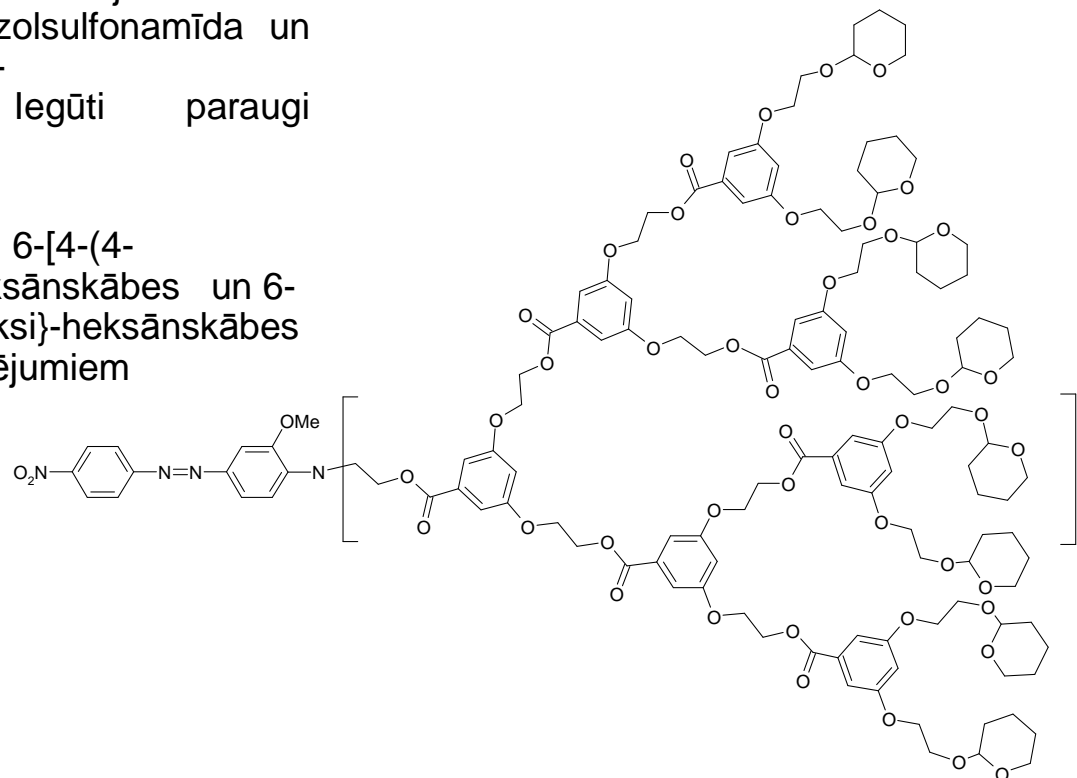
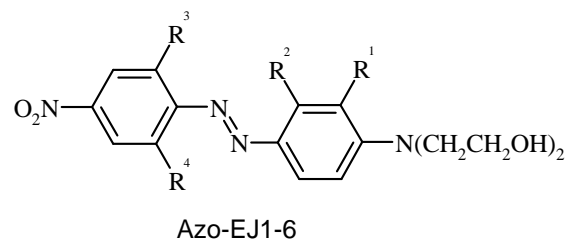


Radīt jaunus un oriģinālus fotoefektīvus organiskos savienojumus (zemmolekulāros savienojumus, oligomērus un polimērus), materiālus un sistēmas fotonikai un optoelektronikai, izmantojot mērķtiecīgu to projektēšanu, sintēzi un izpēti.

Izstrādāta jaunu, tajā skaitā heterociklisku azobenzolu molekulāru hromoforu, dendrimēru un oligomēru sintēze, uzlabotas iepriekš sintezēto nelineāro hromoforu sintēzes metodes, iegūti jauno nelineāro hromoforu paraugi ar pietiekami augstu tīrības pakāpi un veikta to spektroskopisko, molekulārās hiperpolarizējamības un materiālu NLO raksturojumu noteikšana

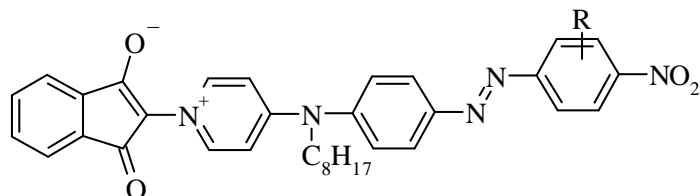
Izstrādātas jaunu DA tipa azobenzola atvasinājumu - N-heksil-N-fenil-4-(4-fenilamino-fenilazo)-benzolsulfonamīda un N-Heksil-N-fenil-4-(4-difenilamino-fenilazo)-benzolsulfonamīda sintēzes metodes. Iegūti paraugi nelineāro optisko procesu pētījumiem

Sintezēti vairāki azobenzola atvasinājumu 6-[4-(4-dicikloheksilsulfamoil-fenilazo)-fenoksi]-heksānskābes un 6-{4-[4-(Heksil-fenil-sulfamoil)-fenilazo]-fenoksi}-heksānskābes paraugi jaunu holografisku materiālu meklējumiem

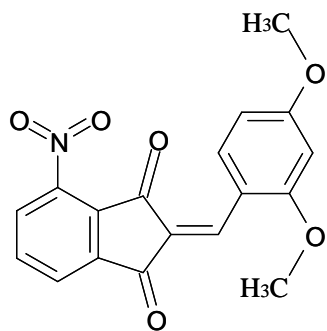


Iegūti nozīmīgi dati par ķīmiskās struktūras ietekmi uz organisko hromoforu īpašībām, kas tiek izmantoti jaunu fotonikas un informācijas tehnoloģijas materiālu iegūšanai.

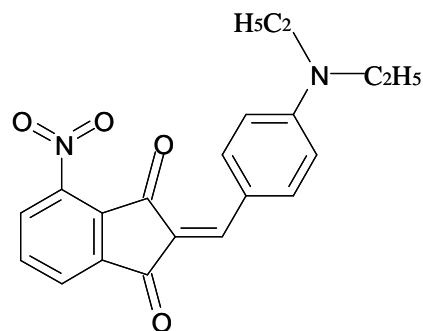
Izstrādātas sintēzes metodes jauniem IPB analogiem, kuri varētu tikt izmantoti organisko nelineāro materiālu ieguvei. Iegūtie hromofori pieder kompleksiem konjugētiem hromoforiem un absorbē 500-700 nm diapazonā



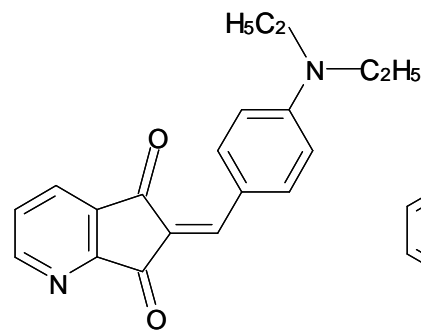
Lai izstrādātu ieteikumus DMABI analoģu sintēzē ar likumsakarīgi mainīgiem enerģētisko līmeņu izvietojumiem veikti MO aprēķini savienojumu rindai ar dažādiem aizvietotājiem ftaloilpaliekā un fenilgredzenā, kā arī realizēta atsevišķu savienojumu sintēze. Elektronegatīvā slāpekļa ievadīšana ftaloilpaliekā izraisa aptuveni tādu pašu batohromu garo viļņu absorbcijas joslas nobīdi kā nitro-grupas ievadīšana tajā pašā pozīcijā, bet lielāko batohromo nobīdi izraisa otrējās aminogrupas ievadīšana fenilgredzena 4'-pozīcijā.



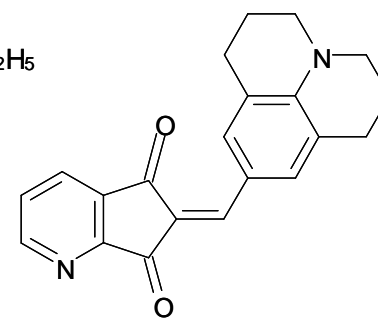
1a



1b

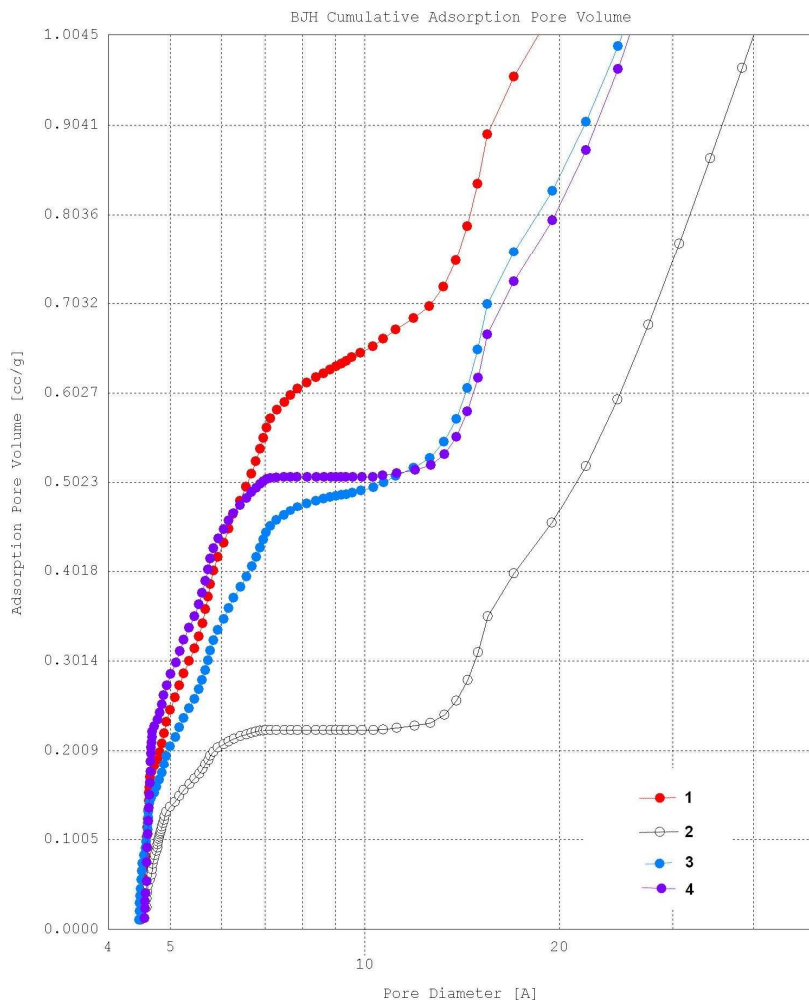


4b



4c

Iegūti nozīmīgi dati par ķīmiskās struktūras ietekmi uz organisko hromoforu īpašībām, kas tiek izmantoti jaunu nelineāri optisko materiālu un heteropāreju tehnoloģijas materiālu iegūšanai.

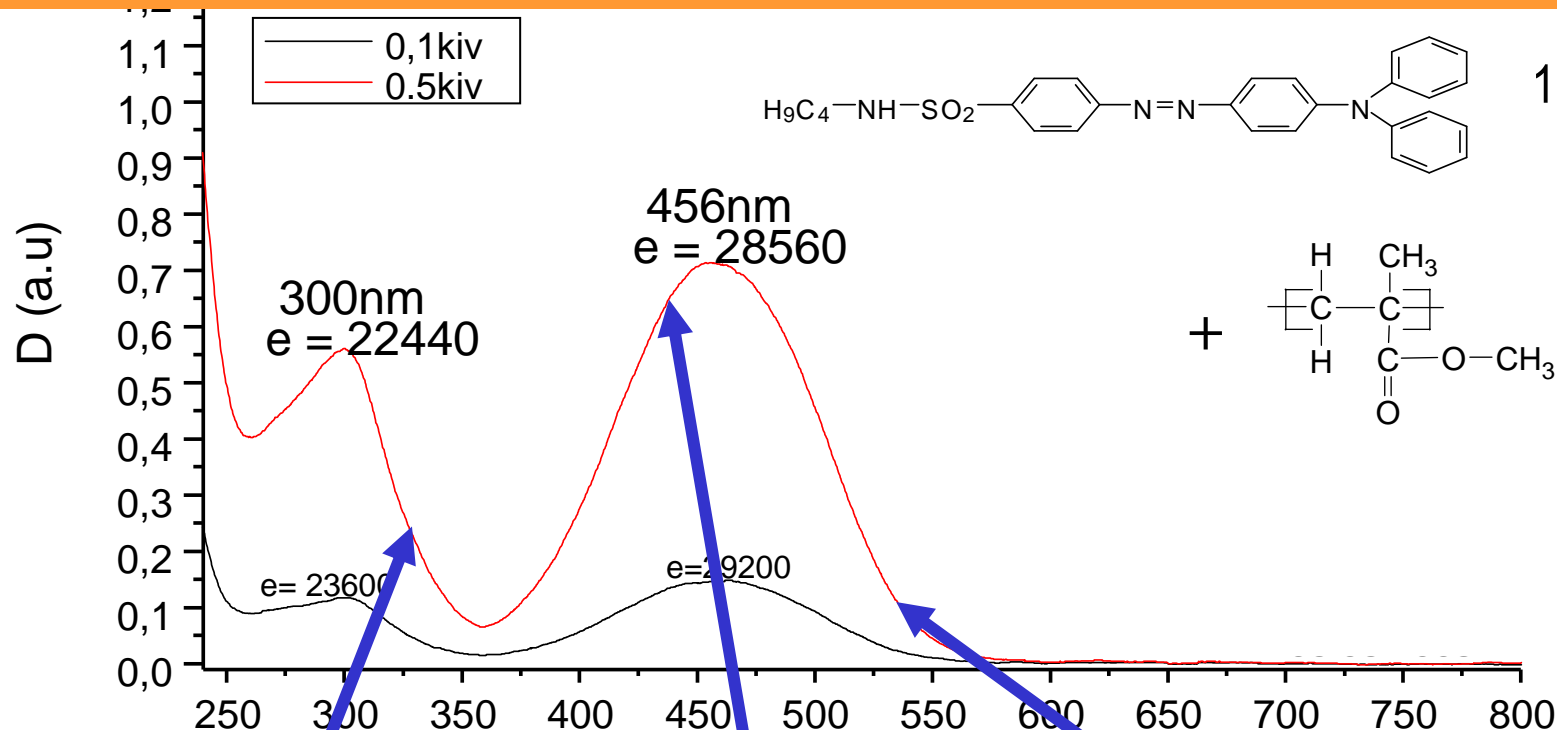


Līknes komulatīvajam poru sadalījumam pēc izmēriem, kas aprēķināts no slāpekļa adsorbcijas izotermām pie 77.3 K. Adsorbenti : 1 – aktīvā ogle AG-3; 2 – aktīvā ogle AG-3, kas piesātināta ar fullerēniem C60 un C70; 3 – AG – 3 pēc fullerēnu pamatmasas (80-90%) izskalošanas; 4 – AG – 3 pēc augstāk minētajām procedūrām un reģenerācijas pie 850-900°C bez gaisa piekļuves.

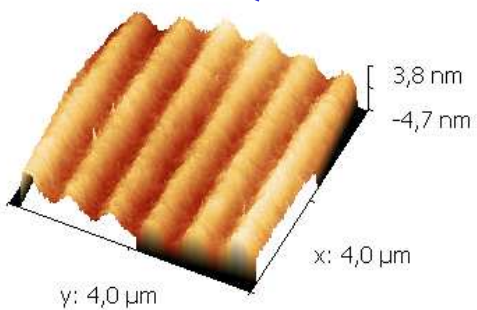
Sintezēti, attīrīti un nodoti citām darba grupām fullerīti gan fotovoltaisko struktūru ieguvei, gan polimēru materiālu kompozītiem. Iegūti jauni dati par oglekļa struktūru sorbcijas spēju un tās uzlabošanas iespējām.

# Virsmas reljefa iegūšana azobenzolos

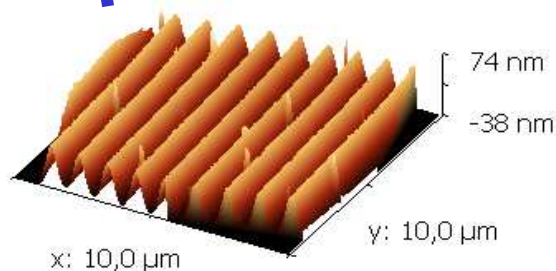
LU CFI, LOSI



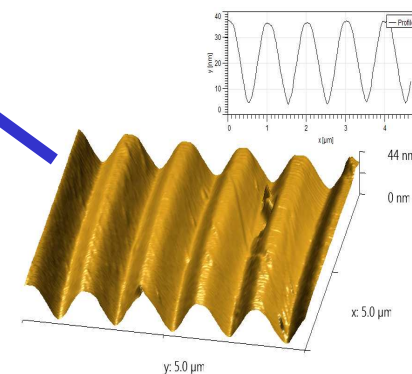
15 wt%



Dziļums 3nm



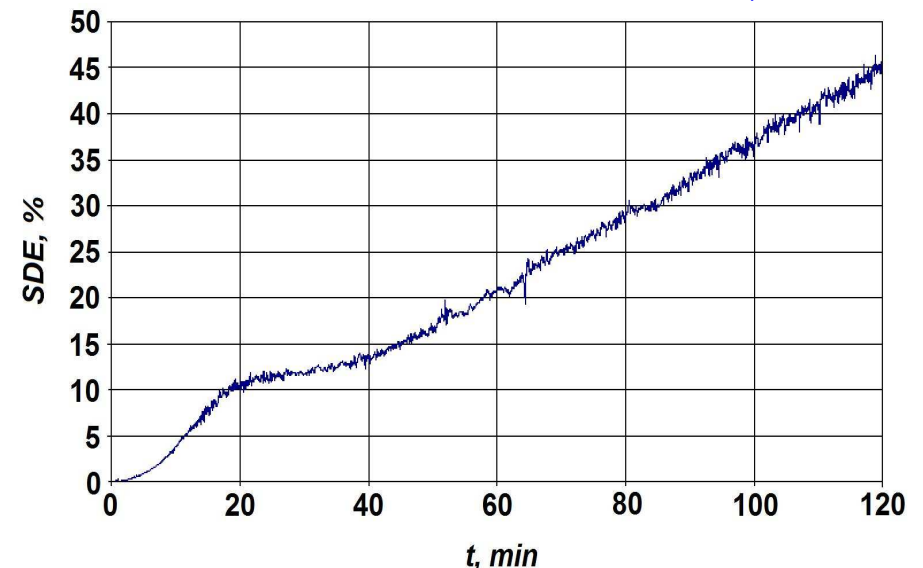
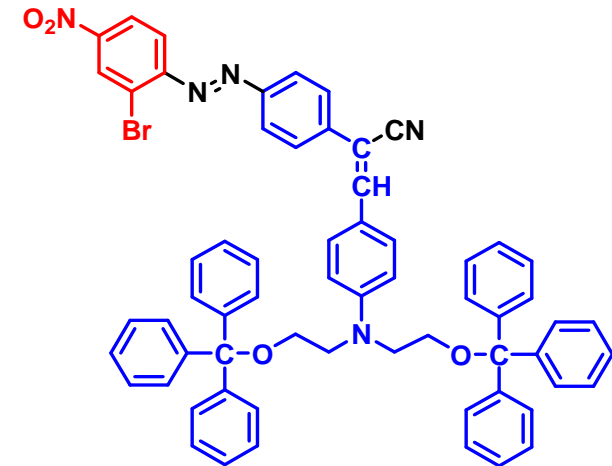
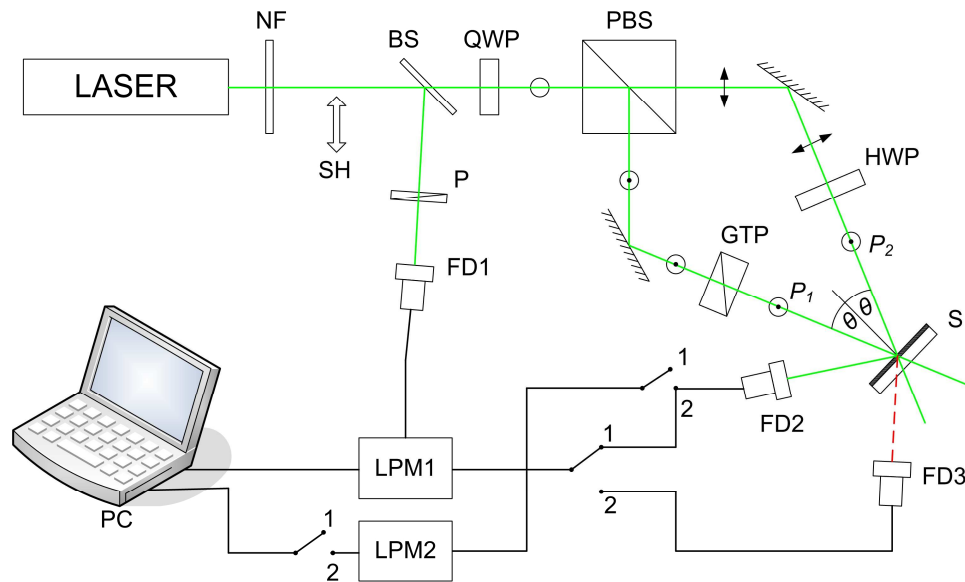
Dziļums 66nm



Dziļums 30nm

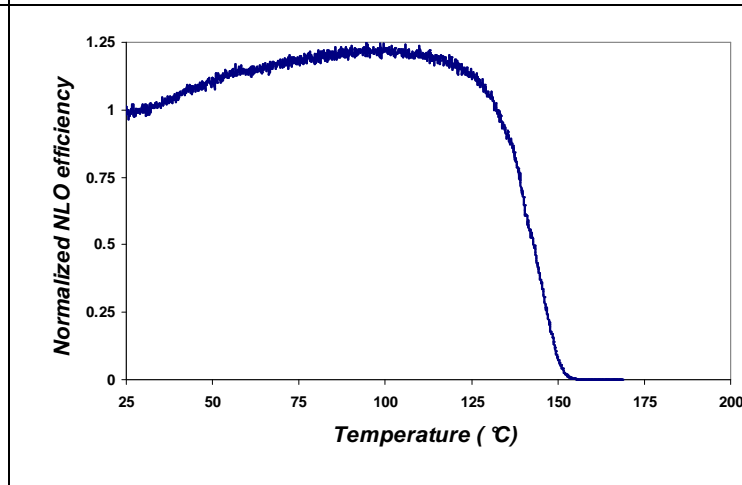
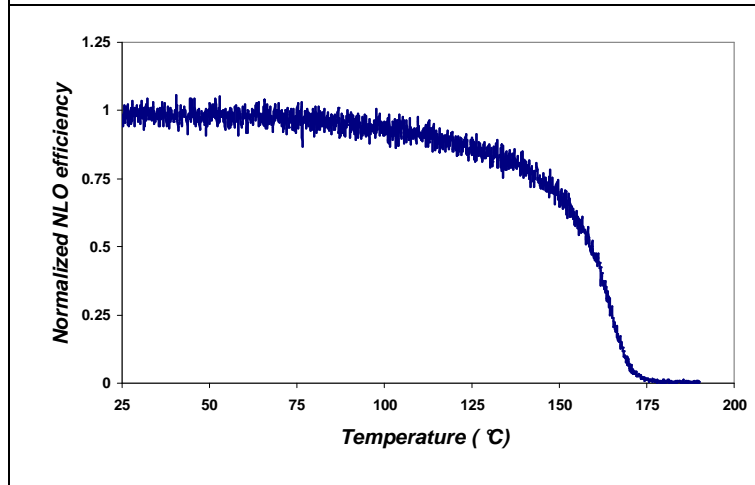
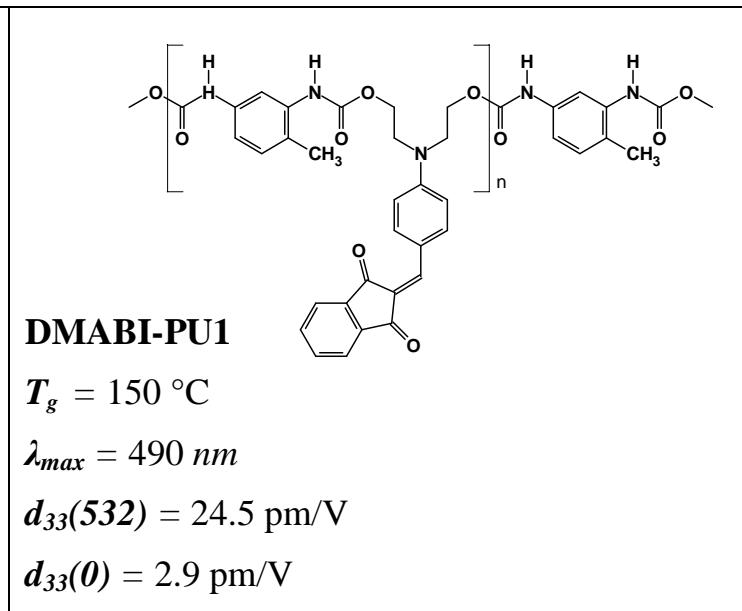
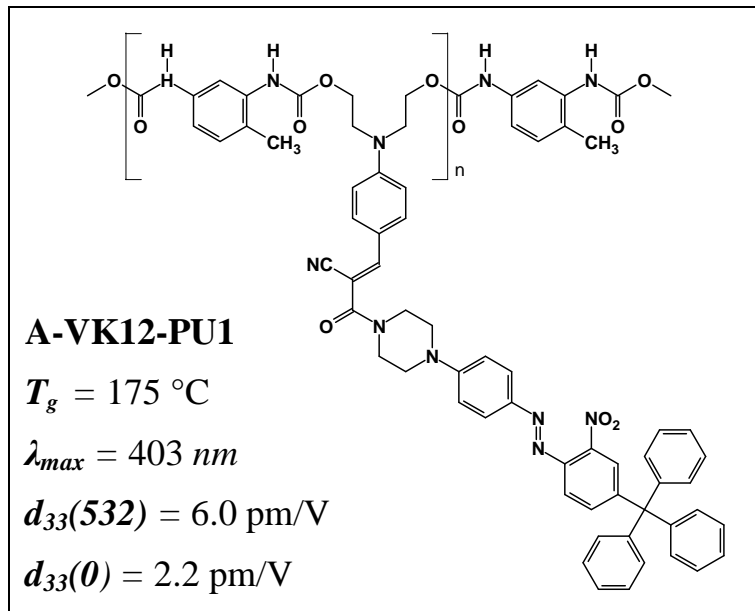
Sadarbībā ar LU CFI Optiskā ieraksta laboratoriju (VPP 1.projekts)

2009.gada 19.novembris



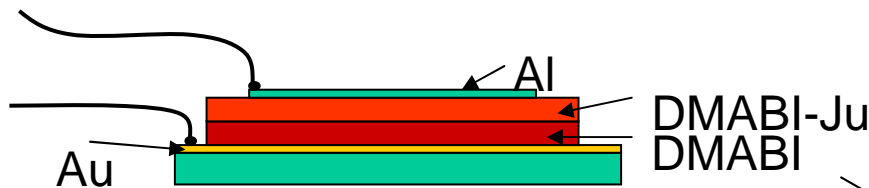
Pašdifrakcijas efektivitātes atkarība no ekspozīcijas laika paraugam, ierakstot skalāru hologrāfisku režģi ar *p-p* polarizācijām pie 633 nm. Ierakstošo staru intensitātes bija  $0.72 \text{ W/cm}^2$ .

Veikta virsmas reljefa hologrammu ieraksta izpēte ar lineārām *s-s* un *p-p* polarizācijām pie 532 un 633nm. Konstatēts, ka vislielāko virsmas reljefa modulācijas amplitūdu ( $d=118 \text{ nm}$ ) izdodas sasniegt pie 532 nm ar *p-p* polarizācijām.

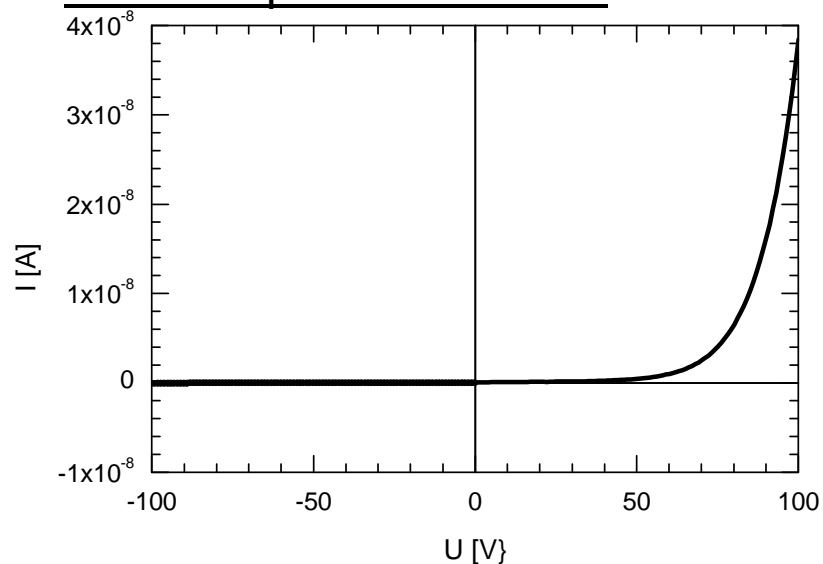


Polimēram A-VK12-PU1 raksturīga ļoti augsta polārās kārtības termiskā izturība ( $T_{NLO \rightarrow 0} > 160\text{ }^\circ\text{C}$ ). Tā atbilst prasībām, kuras tiek izvirzītas NLO materiāliem ļoti augstas integrācijas pakāpes mikroshēmu (VLSI) ražošanā.





## 1. Voltampērraksturlīknes



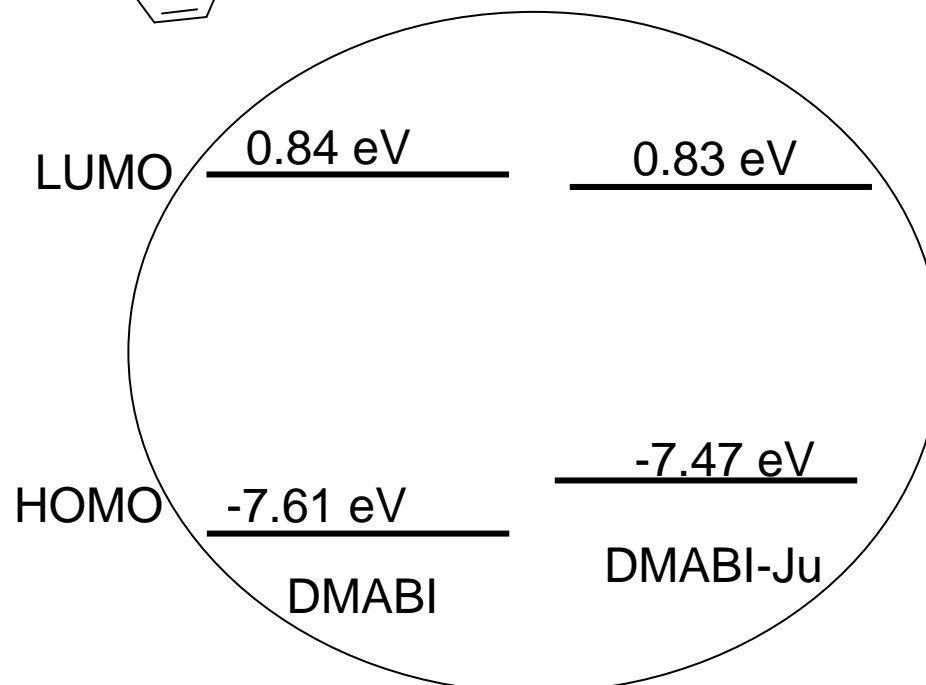
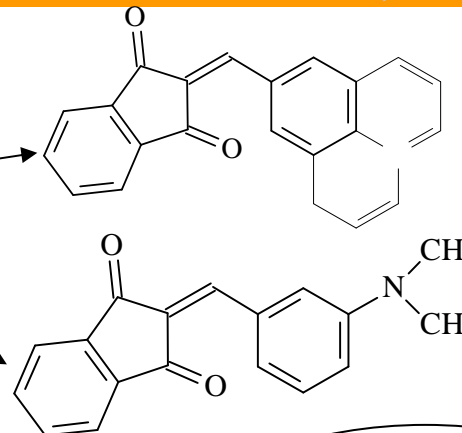
## 2. Voltampērogrammas

$$U_{\text{ox}} = -1,27\text{V} \sim I_G \sim \text{HOMO}$$

$$U_{\text{red}} = 0,88\text{V} \sim A_g \sim \text{LUMO}$$

## 3. Virsmas potenciāls

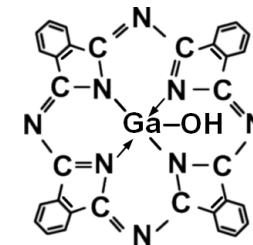
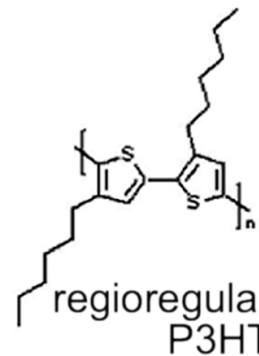
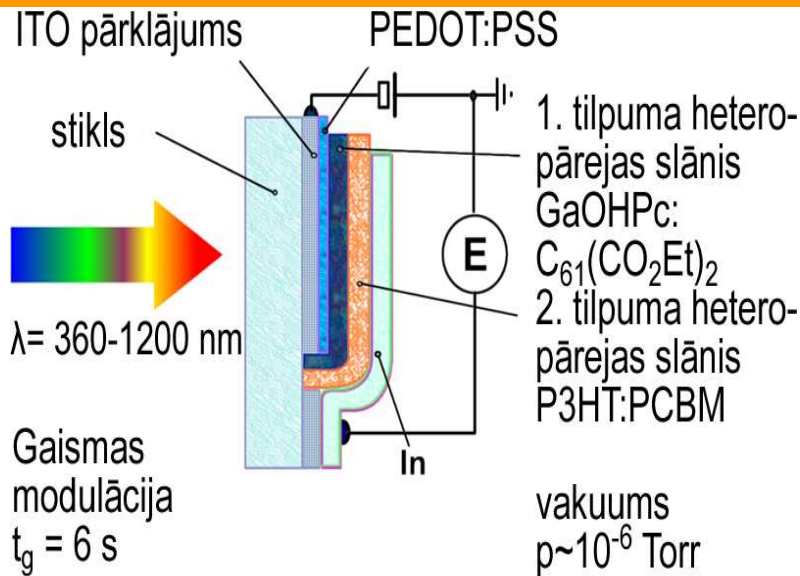
$$U_s = -5,09 \text{ eV} \sim I_c \sim E_v$$



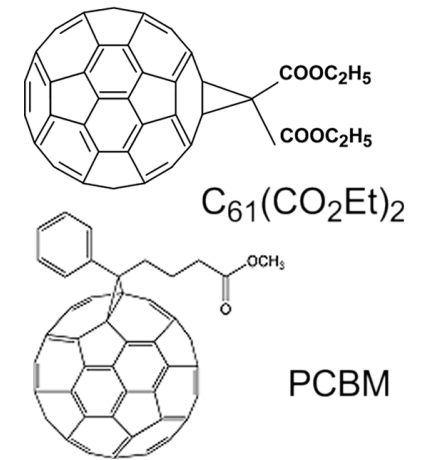
## 4. Kvantu ķīmiskie aprēķini

HOMO, LUMO

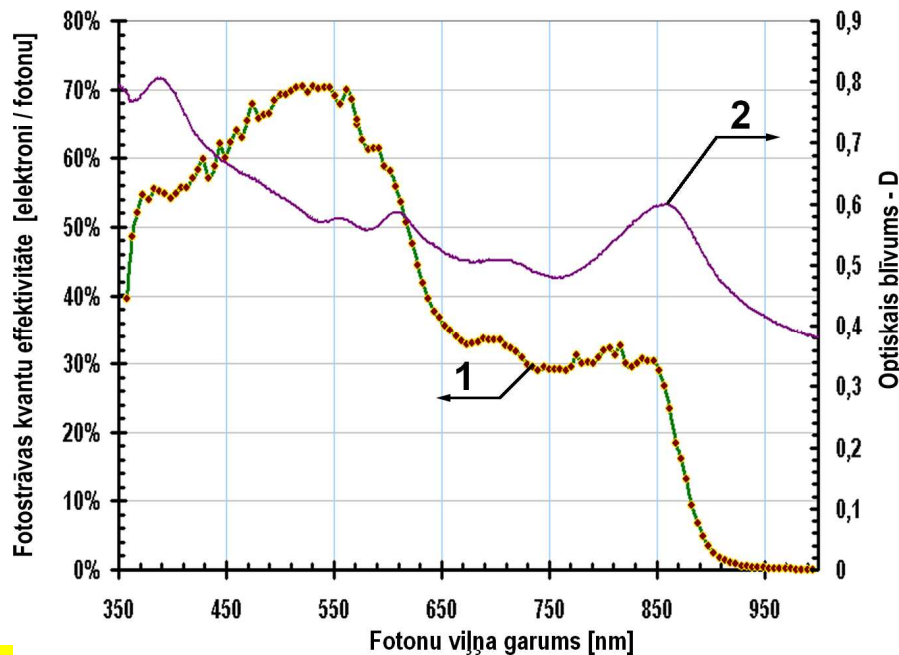
RHF ZINDOS CI 8\*8



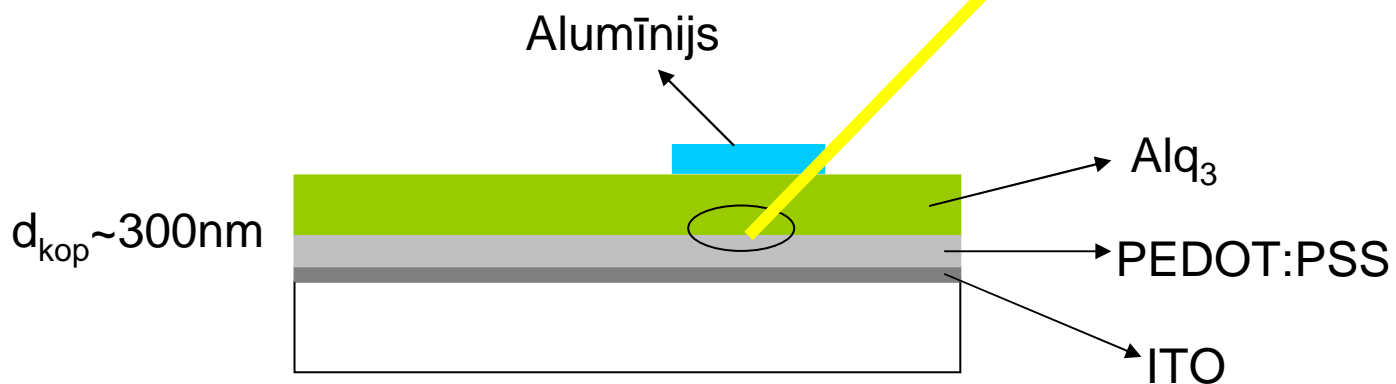
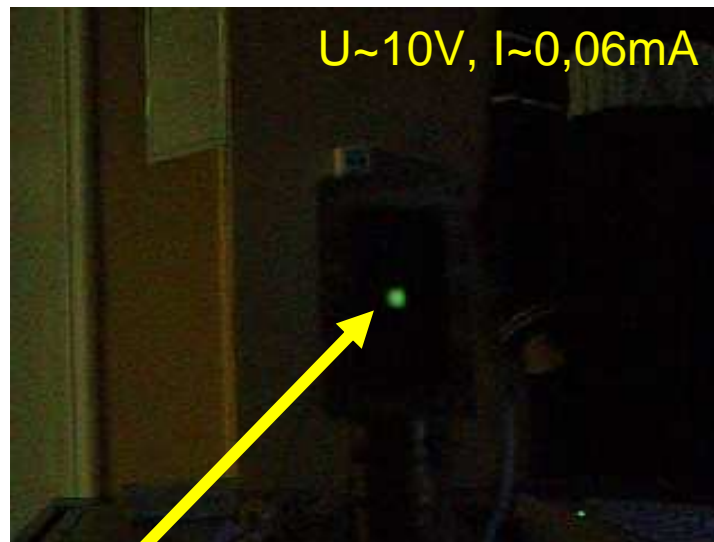
Elektronu Donori



Elektronu Akceptori



Gaismas intensitāte  $10^{12} \text{ fot./ (cm}^2\text{s)}$ ,  
 ārējais spriegums  $U_{\text{ITO}} = - 0.4\text{V}$



Novērota elektroluminiscence plāno kārtiņu struktūrās, kuras veido molekulas ar p- un n- tipa vadāmību.

2009.gada 19.novembris

Veikti pētījumi par nanoporaino zonžu izmantošanu  $\text{nm}^3$  tilpumu vielu nogādāšanu adresējamās vietās, noteikti šīs metodes pielietošanas apgabali. Izpētīti optimālie elektrostatiskie lauki DNS molekulu ievadīšanai zondē un izvadīšanai no zondes. Šobrīd jau ir demonstrēta vielu pārnese izvēlētā individuālā *Allium cepa epidermas* šūnā izmantojot zondi, kura pārklāta ar nanoporainu alumīnija oksīda kārtiņu.

2009.gada laikā projekta ietvaros iegūtie rezultāti

apkopoti

7 publikācijās zinātniskos citējamos žurnālos, sagatavošanā vairāki manuskripti

aprobēti

9 konferencēs ar 27 ziņojumiem

izstrādā

4 maģistra un 5 bakalauru darbi

iesniegti

2 Latvijas patenti (1 ir saistībā ar VPP Enerģētikā)

iegūtas

1 LU stipendija Cietvielu fizikā

Projekta izpildē kopumā piedalās 34 darbinieki,

to skaitā

25 zinātņu doktori,

4 doktoranti,

12 studenti.

Projekta uzdevumi ir izpildīti.



Galvenie rezultāti

jaunu organisko savienojumu sintēze;

priekšnosacījumi cietvielu slāņainu (organisko savienojumu un organisko savienojumu/vadošu slāņu) struktūru iegūšanai un to izpētei



Lietojumiem

- elektrooptiskos modulatoros;
- difrakcijas režģos, optiskos ierakstos;
- nanoelektromehāniskās ierīcēs;
- gaismas emitējošās diodēs un Saules elementos;
- individuālu makromolekulu pārnesei