

УДК 535.376; 661.78; 544.023.2

DOI: 10.17223/00213411/62/10/148

*Ю.В. КОНЫШЕВ, Р.Т. НАСИБУЛЛИН, В.Н. ЧЕРЕПАНОВ, Г.В. БАРЫШНИКОВ, Р.Р. ВАЛИЕВ***ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ
ОТ ЭКСИПЛЕКСА К ПЕРОВСКАИТАМ ***

Приведены результаты теоретических исследований переноса энергии от эксиплекса молекул ТСТА и Bphen к перовскитам CaZrO_3 , SrZrO_3 и BaZrO_3 . В результате определена молекулярная структура эксиплекса ТСТА/Bphen. Предложена расчётная схема, позволяющая качественно сравнивать эффективности переноса энергии от эксиплекса к перовскитам.

Ключевые слова: перовскит, флуоресценция, эксиплекс, органический светодиод.

Введение

Перовскитом называют минерал, который известен как титанат кальция CaTiO_3 . Перовскитами также называют любые материалы со стехиометрической формулой ABX_3 и кристаллической решеткой, схожей с решеткой CaTiO_3 . Благодаря низкой стоимости, высокой скорости переноса заряда и оптическим свойствам, таким, как настраиваемая ширина запрещённой зоны, узкий спектр излучения, высокий коэффициент поглощения, перовскиты используют при создании широкого круга оптических устройств (солнечных панелей, фотодетекторов, светодиодов и т.д.) [1, 2].

За последние несколько лет величина внешнего квантового выхода (EQE) светодиодов на перовскитах (PeLED) значительно выросла, некоторые группы добились впечатляющих результатов, EQE лучших образцов составляет более 20 %, что уже сопоставимо с результатами, полученными для органических и неорганических светодиодов (OLED и LED соответственно) [1, 3]. Следует отметить, что эффективность PeLED-устройств удаётся повысить в том числе за счёт того, что в излучающем слое помимо перовскита используют органические молекулы [4–6]. Существуют различные подходы к использованию органических молекул в PeLED; например, в работе [7] эксиплекс, состоящий из молекул трис (4-карбазоил-9-илфенил)амин (ТСТА) и 4,7-дифенил-1,10-фенантролина (Bphen), использовался в качестве сенситизатора для перовскита BaZrO_3 . Эксиплекс – это молекулярный комплекс, который существует только в возбуждённом состоянии. Максимум спектра флуоресценции эксиплекса смещён в длинноволновую область по сравнению с соответствующими максимумами составляющих этот комплекс молекул. Это приводит к уширению спектра флуоресценции.

Работа [7] интересна тем, что в ней впервые экспериментально показан безызлучательный перенос энергии от эксиплекса, состоящего из органических молекул, к неорганическим наночастицам в PeLED-структуре, благодаря которому наночастицы перовскита активируются. При этом внешний квантовый выход, помимо прочих факторов, зависит от эффективности переноса энергии от эксиплекса к перовскиту, которая может быть оценена с помощью классического механизма Фёрстера [8]. Этот механизм предполагает перенос энергии через безызлучательное диполь-дипольное взаимодействие. Одной из характеристик, влияющей на эффективность переноса энергии, является интеграл перекрытия спектра поглощения акцептора и спектра флуоресценции донора. В работе [7] были экспериментально получены спектры поглощения наночастиц BaZrO_3 (акцептор) и спектры флуоресценции как отдельных молекул ТСТА, Bphen, так и их эксиплекса (донор), а также проведена оценка эффективности переноса энергии по теории Фёрстера.

К сожалению, геометрическая структура эксиплекса не была получена до сих пор. Поэтому целью данной работы является расчёт молекулярной структуры эксиплекса и моделирование его спектра флуоресценции. Также представляет интерес теоретическая оценка эффективности переноса энергии от эксиплекса к другим наночастицам, таким, как CaZrO_3 и SrZrO_3 , содержащим также щелочноземельные атомы.

* Исследование выполнено за счет грантов Российского научного фонда (проекты № 17-73-20012 и 18-19-00268).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>