

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FTMC PUSLAIDININKIŲ FIZIKOS INSTITUTAS

Mindaugas Pranaitis

KRŪVIO PERNAŠOS IR PAGAVOS BEI OPTINIŲ NETIESIŠKUMŲ
TYRIMAS POLIMERINĖSE MEDŽIAGOSE, PERSPEKTYVIOSE
OPTOELEKTRONIKOS TAIKYMAMS

Daktaro disertacijos santrauka
Technologijos mokslai, medžiagų inžinerija (08T)

Vilnius, 2012

Disertacija parengta 2008 – 2012 metais Vilniaus universitete (Lietuva) ir Anžė (Angers) universitete (Prancūzija).

Moksliniai vadovai:

Prof. habil. dr. Vaidotas Kažukauskas (Vilniaus universitetas, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Prof. habil. dr. Bouchta Sahraoui (Anžė universitetas, Prancūzija, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Disertacija ginama Vilniaus universiteto Medžiagų inžinerijos mokslo krypties taryboje.

Pirmininkas:

Prof. habil. dr. Saulius Juršėnas (Vilniaus universitetas, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Nariai:

Doc. dr. Ramūnas Aleksiejūnas (Vilniaus universitetas, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Dr. Abdelkrim El-Ghayoury (Anžė universitetas, Prancūzija, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Dr. Anna Migalska-Zalas (Čenstochovos Jano Dlugošo universitetas, fizikos institutas, Lenkija, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Dr. Roland Tomašiūnas (Vilniaus universitetas, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Oponentai:

Prof. habil. dr. Stelios Couris (Patras universitetas, Graikija, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Dr. Karolis Kazlauskas (Vilniaus universitetas, technologiniai mokslai, medžiagų inžinerija – 08T).

Disertacija bus ginama viešame Medžiagų inžinerijos mokslo krypties tarybos posėdyje. 2012 m. rugsėjo mėn. 21 d. 15 val. Fizikos fakulteto 215 auditorijoje.

Adresas: Saulėtekio al. 9/3, 10222, Vilnius, Lietuva

Disertacijos santrauka išsiuntinėta 2012 m. rugpjūčio mėn. 20 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilnius universiteto ir FTMC Puslaidininkių fizikos instituto bibliotekose.

VILNIUS UNIVERSITY
SEMICONDUCTOR PHYSICS INSTITUTE OF CENTER FOR PHYSICAL
SCIENCES AND TECHNOLOGY

Mindaugas Pranaitis

STUDY OF CARRIER TRANSPORT, TRAPPING AND OPTICAL
NONLINEARITIES IN POLYMERS PROMISING FOR OPTOELECTRONIC
APPLICATIONS

Summary of doctoral dissertation

Technological Sciences, Material Engineering (08T)

Vilnius, 2012

The dissertation has been prepared during 2008-2012 at Vilnius University (Lithuania) and Angers University (France).

Scientific Supervisors:

Prof. habil. dr. Vaidotas Kažukauskas (Vilnius University, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T)

Prof. habil. dr. Bouchta Sahraoui (Angers University, France, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T)

Council of defense of the doctoral thesis of Material Engineering at Vilnius University:

Chairman:

Prof. habil. dr. Saulius Juršėnas (Vilnius University, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

Members:

Doc. dr. Ramūnas Aleksiejūnas (Vilnius University, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

Dr. Abdelkrim El-Ghayoury (Angers University, France, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

Dr. Anna Migalska-Zalas (Institute of Physics of J. Dlugosz University in Czestochowa, Poland, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

Dr. Roland Tomašiūnas (Vilnius University, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

Opponents:

Prof. habil. dr. Stelios Couris (Patras University, Greece, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

Dr. Karolis Kazlauskas (Vilnius University, Technological Sciences, Material Engineering – 08 T).

The official defense of the doctoral thesis will be held at 15.00 on 21st of September, 2012, in 215 lecture room at Vilnius University, Sauletekio av. 9-III, 10222 Vilnius, Lithuania.

Summary of the doctoral thesis is distributed on the 20th of August, 2012.

The dissertation is available at the libraries of Vilnius University and Institute of Physics of Center for Physical Sciences and Technology.

Summary

Organic material engineering and device development carrier transport properties are primary importance as they are directly related with macroscopic material parameters determining device functionality and efficiency.

The main goals of the thesis are advanced characterization by complementary optical and electrical methods of organic semiconductors and the complexes of DNA (deoxyribonucleic acid) designed with purposefully controllable properties for opto-, photo- and electrical applications in modern device engineering.

The thesis is organized as follows: Chapter 1 gives an overview of organic / bio-organic semiconductors and their most general properties. It also introduces the non-linear optical properties of amorphous materials. In the Chapter 2 the fundamentals of the experimental methods are presented: the Charge Extraction by Linearly Increasing Voltage, Thermally Stimulated Current Spectroscopy, Current-Voltage characteristics and Harmonic Generation by Maker fringes methods. The first five sections of Chapter 3 focus on charge carrier transport and trapping in organic semiconductors. In the beginning the functionalized soluble poly(p-phenylenevinylene) (PPV) grafted with push-pull like molecules were purposefully synthesized to investigate the molecular orientation concept. The grafting of the push-pull molecule with a donor/transmitter/acceptor structure, possessing a large ground state dipole momentum, enables the efficient molecular orientation by a DC-electric field. Upon orientation in forward direction increase of the external quantum efficiency by the factor of up to 1.5 – 2.0 is demonstrating. It is associated with the growth of the mobility, resulting also in the increase of the device current. Next the charge transport and trapping phenomena are analyzed in bulk-heterojunction structures of P3HT and PCBM. The energy conversion efficiency of the devices is 3.7 per cent and the fill factor up to 68 per cent. Despite such relatively good parameters, carrier trapping is demonstrating to be effectively involved in the transport phenomena. The evaluated trapping state activation energy is about 0.62 eV and their density reached up to $10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. At such high density these states may probably act as transport states, limiting carrier mobility. Afterwards, the thermally stimulated current depending on the spectral range of the exciting light and applied electrical field is investigating in MDMO-PPV films synthesized in two different routes “gilch” and “sulphinyl”. It is demonstrating that two traps with the Gaussian distribution

of the states and effective mean activation energies of about 0.22 and 0.40 eV are prevailing for “gilch” route synthesized polymers and 0.28 eV for “sulphinyl” route. The trap-filling and charge-generation processes were to be dependent on the excitation wavelength and applied electric field. In the section 5 is presented the weakly expressed carrier trapping by the Thermally Stimulated Current method in DNA:PEDT–PSS thin films, what proves the fast recombination and/or re-trapping of light generated carriers. The “bistable” photoconduction behavior demonstrate below the room temperature at constant light excitation. Most probably such phenomenon could be attributed to the light-induced morphology changes of the samples and/or varying charge transport conditions.

The investigations and results of linear and nonlinear optical properties of bio-organic molecules are presented in the last two sections. It demonstrates that even low concentrations of DNA bio-molecules of about 0.15% can affect the aggregate behavior of the dyes in silica materials, resulting in enhancement of both the linear and nonlinear optical properties of the systems. Later the series of bio-organic samples (Dye1/DNA-DDCA, Dye1/DNA-BA, and Dye2/DNA-BA) were prepared, and their nonlinear optical properties are characterized using the second and third harmonic generation by Maker fringes technique. According to THG measurements, highest value of $\chi_{elec}^{(3)}$ was found for Dye1/DNA-BA sample and was two orders of magnitude higher than that of the fused silica, the standard reference material. Within the experimental errors, there were no differences observed in $\chi_{elec}^{(3)}$ values which might have resulted from the ionic surfactant origin.

Padėka

Pirmiausia aš norėčiau padėkoti abiem savo darbo vadovams, tai prof. habil. dr. Vaidotui Kažukauskui ir prof. habil. dr. Bouchtai Sahraoui už puikų vadovavimą, rūpestį ir pagalbą dirbant mokslinį darbą bei rengiant disertaciją.

Nuoširdžiai ačiū kolegoms už puikią darbinę atmosferą, gerą nuotaiką, patarimus ir pagalbą.

Labai dėkoju Prancūzijos ambasadai už suteiktą galimybę stažuotis Anžė universitete (Prancūzija).

Širdingai ačiū mano šeimai už supratimą ir palaikymą.

Ivadas

Šiuolaikinė organinė optoelektronika užima svarbią vietą medžiagų moksle ir inžinerijoje dėl savo lankstumo, lengvumo ir mažų gamybos sąnaudų. Organinės medžiagos vis plačiau taikomos daugelyje sričių, pavyzdžiui, organiniai šviesos diodai (OLED), saulės elementai (OPV), lauko tranzistoriai (OFET) ir šviesą valdantys jutikliai. Taip pat organinės, polimerinės medžiagos taikomos ir fotonikoje: optiniai perjungėjai, modulatoriai, polimerinės integrinės schemos ir kt.

Konjuguoti polimerai ir mažos molekulės turi milžinišką privalumą prieš neorganines: didelis medžiagų pasirinkimas, lengvai valdomos optinės ir elektrinės savybės, keičiant cheminių ryšių struktūrą ir medžiagos sudėtį. Organiniai puslaidininkiai yra daug pigesni ir puiki alternatyva siliciui ir kitoms elektronikoje naudojamoms medžiagoms. Be to, organinių medžiagų technologija dažnai daug paprastesnė nei neorganinių puslaidininkių. Ypač šiuo atžvilgiu patrauklūs konjuguoti polimerai.

Norint efektyviai panaudoti polimerus būsimų prietaisų gamybai, yra svarbus pernašos ir pagavimo ypatybių tyrimas bei analizė. Polimerų, kaip ir kitų puslaidininkių, naudojamų prietaisų gamybai, savybės iš esmės priklauso nuo medžiagos laidumo ir krūvininkų judrio.

Puikiai žinoma, kad mikroskopinės organinių puslaidininkių savybės, tokios kaip krūvininkų judris ir pagavimas, yra lemiamas veiksnys prietaisų veikimo efektyvumui. Krūvininkų pernašos tyrimai konjuguotose polimeruose yra vienas iš svarbiausių reiškinų. Kitas svarbus mokslinių tyrimų objektas yra krūvininkų pagavimas medžiagoje, kuris daugeliu atveju sumažina krūvininkų judrį, sutrikdo vidinį elektrinį lauko pasiskirstymą, sumažina luminescencijos efektyvumą. Dėl šios priežasties yra svarbus defektinių būsenų energetinis pasiskirstymas, kuris padeda suprasti ir optimizuoti krūvio pernašą prietaisuose.

Organinės medžiagos gali būti puikiai pritaikomos ir fotonikoje dėl technologiškai valdomų sugerties ir luminescencijos spektrų savybių. Be to, organinės netiesinės optikos medžiagos yra lengvai suderinamos su jau esamų optinių grandinių technologijomis.

Organiniams dariniams būdinga silpna Van der Valso sąveika tarp molekulių. Ši silpna tarpmolekulinė sąveika yra pagrindinis skirtumas, lemiantis visiškai kitokias

organinių kietųjų kūnų savybes ir jų teorinį aprašymą. Kaip žinoma, neorganinių puslaidininkinių sluoksnių gamybai reikia naudoti sudėtingą vakuuminę techniką ir aukštas temperatūras, o jie patys yra trapūs, todėl jų negalima panaudoti lanksčių sluoksnių gamybai. Daugelis naudojamų neorganinių medžiagų ekologiniu požiūriu yra kenksmingos, todėl iškyla jų utilizavimo problemos. Tuo tarpu organiniai mažamolekuliniai, ir ypač polimeriniai fotopulsaidininkiai yra pranašesni, gaminant įvairaus storio plėveles iš jų tirpalų. Gautos plėvelės pasižymi gera adhezija prie metalizuoto paviršiaus, jos optiškai skaidrios, lanksčios; visa tai leidžia formuoti sluoksnius ant lankstaus pagrindo.

Darbo tikslas – išanalizuoti veiksnius, įtakančius krūvio pernašą ir pagavimą šiuolaikinėse organinėse medžiagose skirtose optoelektronikai bei ištirti DNR biomolekulių įtaką elektrinėms bei optinėms savybėms.

Uždaviniai:

1. Ištirti polinių molekulių erdvinės orientacijos įtaką poli(p-fenilenvinileno) PPV polimero junginyje skirtame fotovoltiniams elementams.
2. Ištirti krūvio pernašą ir pagavimą (poli-3-heksiltiofeno):([6,6]-fenil-C61-sviesto rūgšties metilo esterio) P3HT:PCBM aktyviajame mišinyje ir skirtingais būdais susintetintame (poli(2-metoksi-5-(3'-7'-dimetil-oktiloksi))-p-fenilenvinileno) MDMO-PPV polimere.
3. Ištirti elektrines bei tiesinės ir netiesinės optikos savybes bio-organinėse medžiagose, sudarytose iš DNR ir skirtingų tipų surfaktantų kompleksų, skirtų fotonikos pritaikymams.

Mokslinis naujumas ir svarba

1. Polimeriniai fotovoltiniai prietaisai, turintys aktyviojo sluoksnio struktūrą: donoras/pernašos grandis/akceptorius ir chemiškai sujungti su polinėmis molekulėmis, pasižymi išorinio kvantinio našumo padidėjimu, susijusiu su judrio išaugimu ir sumažėjusiu potencialo barjeru krūvininkų injekcijai ar ekstrakcijai iš elektrodų.
2. Panaudojant keletą skirtingų, bet papildančių eksperimentinių metodų, parodyta pagavimo būsenų ir jų energetinio bei erdvinio pasiskirstymo įtaka krūvininkų pernašos savybėms organiniuose puslaidininkiuose.

3. Pademonstruota, kad krūvininkų pagavimas efektyviai lemia krūvio pernašos reiškinius ir priklauso nuo žadinančios šviesos spektro pločio bei pridėto elektrinio lauko.
4. Įrodyta DNR komplekso, sudaryto iš dažo ir silikagelio matricos, įtaka optinėms medžiagos savybėms.
5. Pademonstruoti nauji katijoniniai surfaktantai su efektyviomis trečios eilės netiesinės optikos savybėmis, kurie išplečia tirpiklių pasirinkimą gaminant DNR kompleksus.

Praktinė nauda

Tirtos medžiagos ir junginiai yra naudojami polimerinių prietaisų tokių kaip fotovoltiniai elementai ir šviesos diodai taikymuose. Atlikti tyrimai suteikia informacijos apie eksitonų atskyrimą ir pagerėjusią krūvio pernašą struktūroje. Atlikti tyrimai bio-organinėse ir hibridinėse medžiagose įgalina naudoti DNR struktūras fotonikos ir optoelektronikos prietaisų taikymuose.

Ginamieji teiginiai:

1. Funkcionuotų poli(p-fenilenvinileno) polimero junginių su chemiškai prijungtomis polinėmis molekulėmis išorinis kvantinis našumas padidinamas iki 40 proc., orientuojant aktyvias polines 4-(N-butyl-N-2-hidroksietil)-1-nitrobenzeno grupės molekules; šis procesas siejamas su krūvininkų judrio kitimu.
2. Didelis – iki 10^{18} cm^{-3} – nehomogeniškai pasiskirsčiusių pagavimo būsenų tankis π -konjuguotuose P3HT:PCBM (poli-3-heksiltiofeno):([6,6]-fenil-C61-sviesto rūgšties metilo esterio) polimeruose yra vienas iš pagrindinių faktorių, lemiančių krūvininkų pernašos reiškinius.
3. Žadinančios šviesos spektro plotis ir pridėtas elektrinis laukas keičia π -konjuguotų polimerų MDMO-PPV (poli(2-metoksi-5-(3'-7'-dimetil-oktiloksi))-p-fenilenvinileno) pagavimo būsenas, pasiskirsčiusias pagal energijas, užpildymą, o tai leidžia tiesiogiai įvertinti šį pasiskirstymą.
4. Organinių ir hibridinių medžiagų funkcionavimas DNR bio-molekuliniiais kompleksais padidina jų optinį pralaidumą nuo 3 iki 15 proc., suintensyvina fluorescensiją nuo 100 iki 300 proc., o taip pat stebimas iki 6 kartų stipresnis netiesinis optinis trečios eilės jautris, lyginant su medžiagomis be DNR. Šias darinių savybes lemia konjuguotų π -elektronų buvimas DNR nukleobazėje.

Disertacijos struktūra. Disertacija sudaryta iš trijų pagrindinių dalių: įvado, eksperimentinės metodikos aprašymo, matavimų rezultatų, išvadų ir literatūros sąrašo. Tekstas pateiktas anglų kalba. Disertaciją sudaro 113 puslapių su 58 paveikslais ir 2 lentelėmis.

Pirmajame disertacijos skyriuje apžvelgiamas mokslinių tyrimų aktualumas. Taip pat pagrindžiama tiriamoji problema, tikslas, uždaviniai, darbo naujumas ir jo reikšmė, pateikiami ginamieji disertacijos teiginiai.

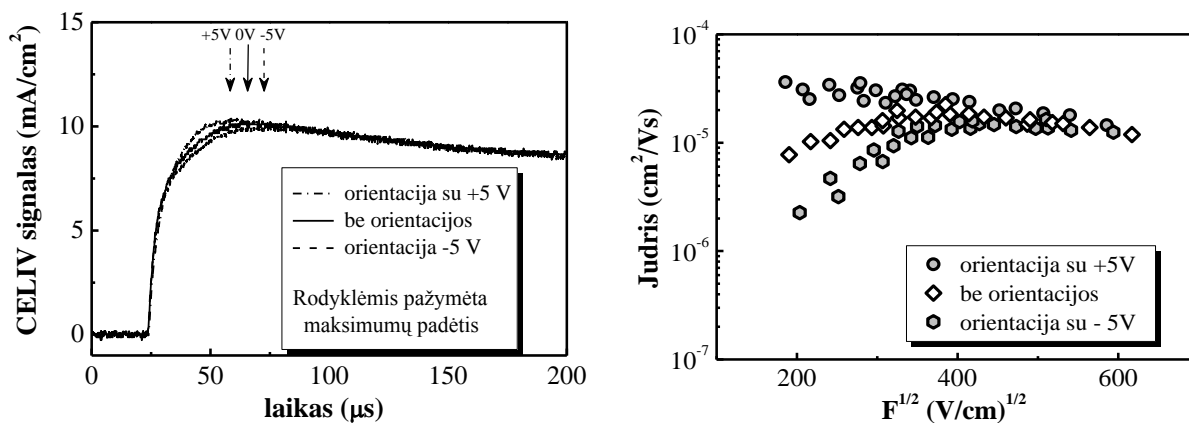
Eksperimentinės metodikos ir matavimo įranga aprašoma antrajame skyriuje. Polimerinių puslaidininkių judrio matavimai buvo atliekami krūvio ištraukimo tiesiškai didėjančia įtampa metodu (angl. CELIV). Krūvininkų pagavimas ir jį lemiantis būsenų tankio energetinis pasiskirstymas buvo tiriami šiluma skatinamųjų srovių (ŠSS) metodika. Netiesinės optinės medžiagų savybės buvo tiriamos, taikant antros ir trečios harmonikų generavimą medžiagoje, naudojant Meikerio juostų metodą.

Matavimų rezultatai pateikiami 3 skyriuje. Jis suskaidytas į 6 dalis, kiekvienoje iš jų aprašomi atlikti eksperimentai, pateikiami ir aptariami rezultatai.

3-ojo skyriaus pirmoje dalyje, atlikus molekulių orientavimą, buvo tiriamos elektrinės ir optinės polimerinių bandinių savybės.

Polinių molekulių orientavimo efektas gali būti padidintas ir stabilizuotas laike, jei polinės molekulės nėra sumaišytos rišančioje polimerinėje medžiagoje, bet yra chemiškai prijungtos prie nepolinės polimero grandies. Tam tikslui pasiekti buvo susintetintas poli(p-fenilenvinileno) (PPV) darinys su prijungta poline grupe. Detaliai (NLO-PPV) medžiagos sintezė aprašyta [1]. Aktyvi polinė molekulė yra 4-(N-butyl-N-2-hidroksietil)-1-nitro-benzono grupės kopolimeras. PPV pasirinktas dėl to, jog yra vienas tinkamiausių konjuguotų polimerų, įgalinančių pasiekti didelį Saulės energijos konversijos efektyvumo padidėjimą.

Naudodami krūvininkų ištraukimo tiesiškai didėjančios įtampos metodiką [2], tyrėme susintetintų polinių molekulių ir poli(p-fenilenvinileno) darinių krūvininkų judrį priklausomai nuo molekulių grandžių orientacijos išoriniu elektriniu lauku. Iš 1 pav. matyti, jog stebimos charakteringųjų CELIV kreivių maksimumų padėtys ir judrio priklausomybės nuo elektrinio lauko stiprio priklauso nuo molekulių orientacijos.



1 pav. Krūvininkų judrio elgsenos tyrimas NLO-PPV medžiagoje. Kairėje: CELIV oscilogramos, gautos skirtingai orientuojant molekules. Dešinėje: judrio priklausomybės nuo pridėto elektrinio lauko stiprio, orientavus molekules.

Šiame paveiksle po orientacijos stebimas laiko maksimumo padėties pokytis parodytas rodyklėmis. Iš šių eksperimentinių kreivių šeimos maksimumo padėčių buvo apskaičiuotas krūvininkų judris, pasinaudojant formule:

$$\mu = \frac{2d^2}{3At_{\max}^2 \left[1 + 0.36 \frac{\Delta j}{j_0} \right]}, \quad (1)$$

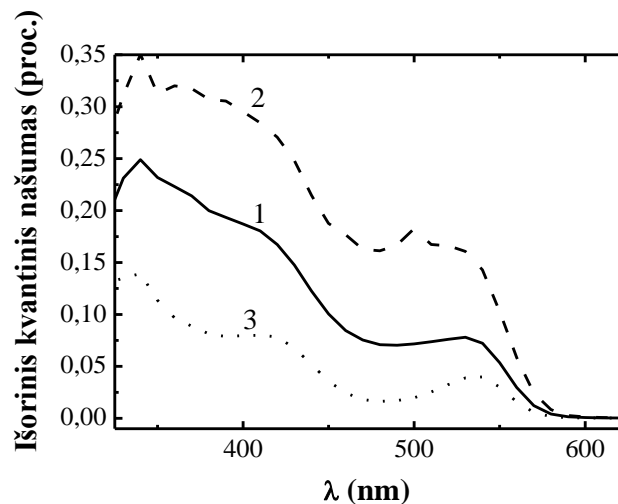
čia d – bandinio storis, A – įtampos augimo greitis, t_{\max} – laikas per kurį pasiekiamas srovės maksimumas, j_0 – slinkties srovė, sąlygota geometrinės bandinio talpos, Δj – ekstrakcijos srovė.

Matosi, jog didesnis judrio skirtumas gaunamas silpnesniuose elektriniuose laukuose. Didėjant elektrinio lauko stipriui, skirtumas tampa mažiau išreikštas. Tai gali būti aiškinama tuo, kad orientuojasi tik dalis molekulių [3]. Dėl to, esant stipriam išoriniam laukui, vidinis laukas įtakos nebedaro, todėl tampa dominuojanti įprastinė krūvininkų pernaša nevienalytėje medžiagoje. Šioje srityje stebimas judrio mažėjimas stiprėjant elektriniam laukui – vadinamoji „neigiama“ judrio priklausomybė, kuri gali būti sąlygota erdvinių sistemos nevienalytiškumų.

Mažuose elektriniuose laukuose stebima molekulių grandžių orientacijos įtaka. Žymus judrio mažėjimas matomas, orientavus molekulių grandis taip, kad vidinis laukas yra užtvarinis. Galima manyti, jog orientacija užtvarine kryptimi žymiai padidina energetinę netvarką sistemoje, todėl, didėjant elektrinio lauko stipriui, judris auga, kaip

tai numato GDM modelis [4]. Priešingai, jei molekulių grandys orientuotos taip, kad sukuriamas laidumo krypties vidinis laukas, energetinė netvarka sumažinama ir judris išauga.

Bandiniuose buvo atlikti ir išorinio kvantinio našumo matavimai, orientuojant polines molekules. Apšvietimui buvo naudojamas saulės spektro 1,5 AM stimulatorius. Matavimų rezultatai pateikti 2 pav.

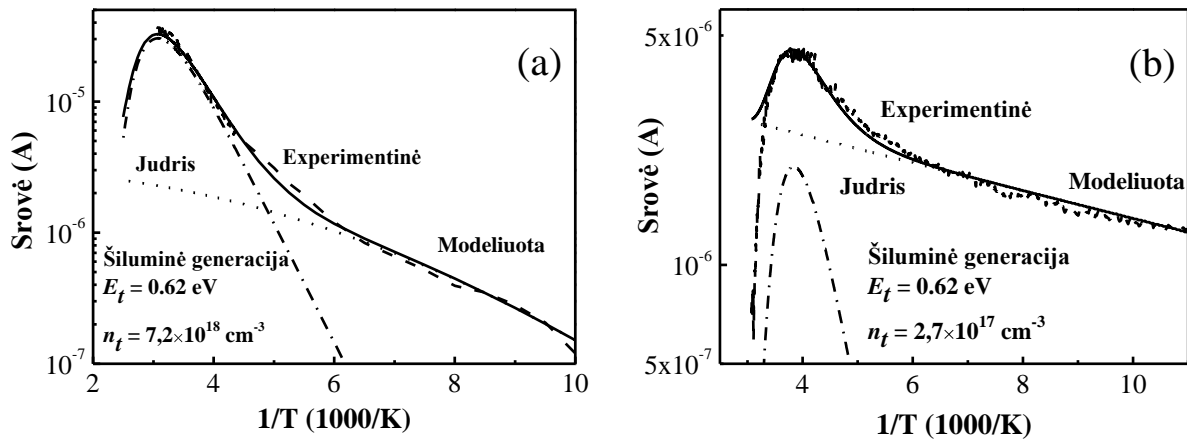


2 pav. Išorinio kvantinio našumo efektyvumo spektrai, išmatuoti skirtingai orientavus polines molekules. 1 – pradinė charakteristika, 2- orientavimas tiesiogine kryptimi (+5V), 3 – orientavimas užtvarine kryptimi (-5V).

Išmatuoti spektrai rodo, kad fotogeneruota srovė priklauso nuo orientavimo įtampos krypties. Stebimas iki 40 proc. išorinio kvantinio našumo padidėjimas gali būti nulemtas krūvininkų judrio ir srovės, tekančios per bandinio aktyvųjį sluoksnį, padidėjimo.

Trečiojo skyriaus antroje dalyje aprašoma krūvininkų pernaša ir pagavimas P3HT (poly-3-heksiltiofeno) ir PCBM ([6,6]-fenil-C61-sviesto rūgšties metilo esterio) mišinyje, skirtame organinių fotovoltinių elementų gamybai. Tirtųjų struktūrų energijos konversijos efektyvumas siekė 3,7 proc., o apšviestų 1,5 AM spektro šviesa elementų voltamperinių charakteristikų užpildos faktorius viršijo 68 proc. Nustatyta, kad nepaisant šių neblogų kiekybinių rodiklių, krūvininkų pernašą stipriai veikia jų pagavimas. Šių reiškinių tyrimui buvo pritaikytas šiluma skatinamų srovių metodas (ŠSS), [5] padedantis įvertinti gaudyklių parametrus. Srovės kitimas bandiniuose buvo analizuojamas, atsižvelgiant ir į krūvininkų šiluminę aktyvaciją iš gaudyklių, ir į jų

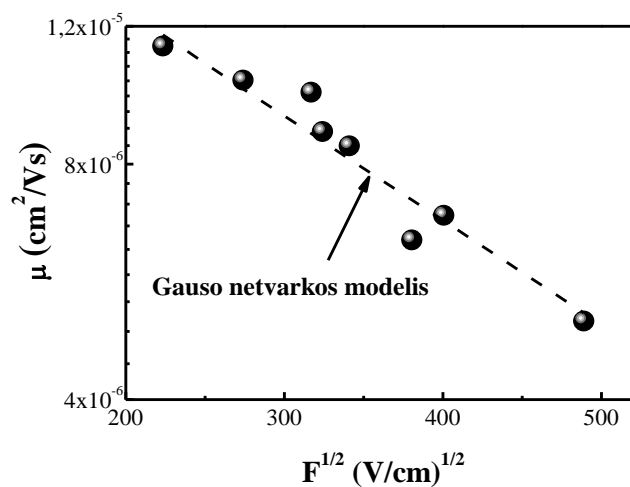
judrio kitimą, nusakomą Gauso netvarkos modeliu [4]. ŠSS kreivės ir jų skaitmeninis modeliavimas pateikiamas 3 pav. dviejuose bandiniuose.



3 pav. Eksperimentinės priklausomybės (punktyrinė linija) ir modeliėtų kreivių priklausomybės (ištininė linija), įskaitant krūvininkų judrio kitimą (taškuota linija) ir šiluminę krūvininkų generaciją (punktyrinė, taškuota kreivė) dviejuose bandiniuose (a ir b).

Įvertinus, gauta aktyvacijos energija, siekianti 0,62 eV, o gaudyklių tankis – 10^{17} – 10^{18} cm^{-3} . Esant tokiam dideliame šių būsenų tankiui, jos gali elgtis kaip krūvio pernašos būsenos tarpininkaujantios krūvininkų šokavime ir lemiančios krūvininkų judrį. Sutampančios pagavimo būsenų energijų aktyvacijos vertės skirtinguose bandiniuose reiškia, kad jos susijusios su struktūriniais pakitimais, bet ne dėl priemaišų buvimo.

Krūvininkų judrio matavimai atlikti CELIV metodu parodyti 4 pav.



4 pav. Judrio priklausomybė nuo pridėto elektrinio lauko stiprio ir jo elgsenos modeliavimas Gauso netvarkos modeliu.

Stebima neigiama judrio priklausomybė, kurioje krūvininkų pernašą lemia pozicinė netvarka. Pozicinės netvarkos vyravimas logiškas saulės elementuose su tūrine hetero struktūra, kurioje erdvinė netvarka yra būtina dideliame efektyvumui pasiekti. Eksperimentiniai rezultatai buvo aproksimuoti GDM modeliu [4].

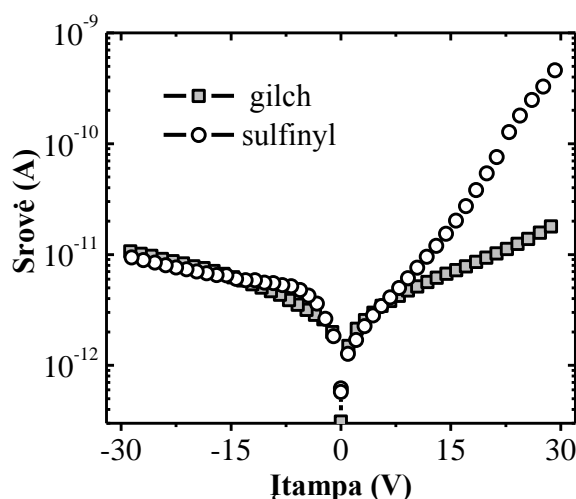
$$\mu(F, T) = \mu_{\infty} \exp \left[- \left(\frac{2\sigma}{3kT} \right)^2 \right] \exp \left\{ C \left[\left(\frac{\sigma}{kT} \right)^2 - \Sigma^2 \right] \sqrt{F} \right\} \quad (2)$$

Gauso netvarkos modeliu aprašoma krūvio pernaša netvarkiose struktūrose, laikant, jog pernaša vyksta krūvininkams peršokant tarp būsenų, netvarkingai išsidėsčiusių erdvėje (parametras Σ) ir pagal energiją (parametras σ).

Judrio parametrai, gauti analizuojant šiluma skatinamųjų srovių priklausomybes ir tiesiogiai matuojant judrį, sutampa. Tai parodo, kad krūvininkų pagavimas yra krūvininkų elgseną medžiagoje įtakojantis veiksnys.

Trečiojoje dalyje šiluma skatinamųjų srovių metodu tyrėme krūvio pagavimo savybes (poli(2-metoksi-5-(3'-7'-dimetil-oktiloksi))-p-fenilenvinileno) (MDMO-PPV) polimeruose, susintetintuose skirtingais būdais (gilch ir sulfinyl), bet tokios pačios cheminės sudėties.

Bandinių pagamintų skirtingais būdais, voltamperinės charakteristikos taip pat skyrėsi (5 pav.).

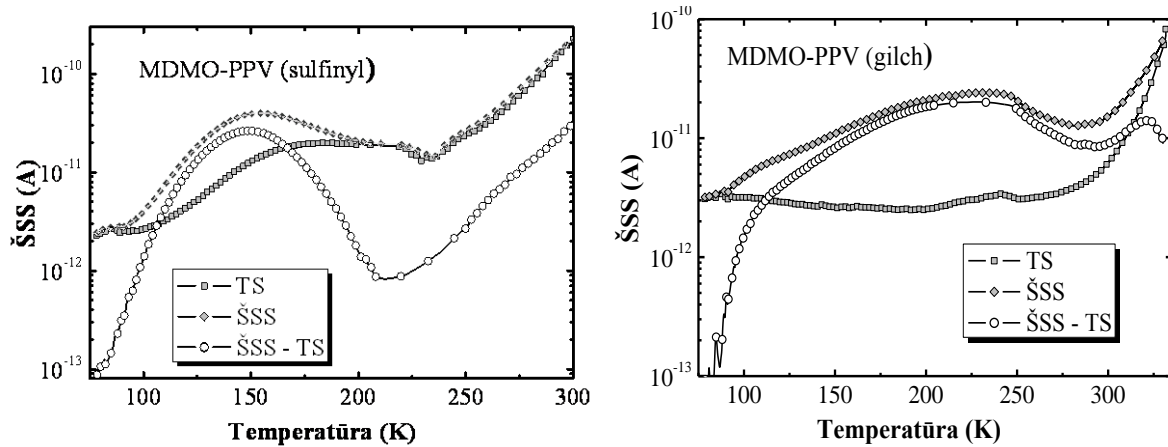


5 pav. MDMO-PPV polimerinių bandinių, sintezuotų skirtingais metodais, voltamperinės charakteristikos 290 K temperatūroje.

Gilch būdu pagamintame bandinyje buvo stebimas mažesnis laidumas tiesiagine kryptimi. Tai gali būti susiję su didesniu gaudyklių ar/ir rekombinacinių būsenų

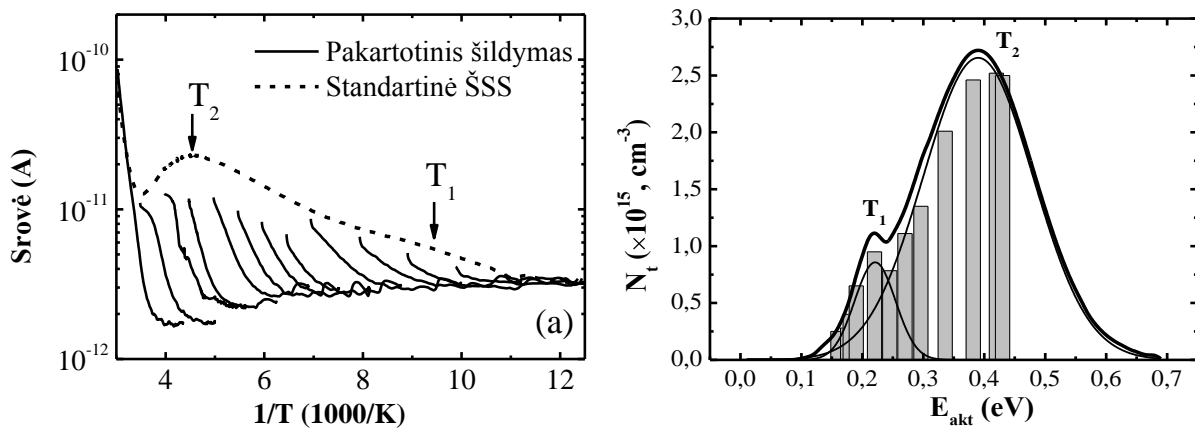
skaičiumi. Atlikus matavimus užtvarine kryptimi, gauti rezultatai buvo panašūs, kas parodo, kad srovė tekanti per bandinį valdoma aukšto Al/MDMO-PPV kontaktinio barjero.

Šiluma skatinamųjų srovių spektrai skirtinguose bandiniuose pateikti 6 pav.



6 pav. Eksperimentiniai ŠSS spektrai po sužadavimo (-◇-), tamsinės srovės (-□-) ir jų skirtumas (-○-) dviejuose bandiniuose, susintetintuose gilch ir sulfanyl būdais.

Juose matomas akivaizdus šiluminės krūvininkų generacijos iš gaudyklių efektas. Kiekybinei gaudyklių parametrų analizei buvo naudotas klasikinis ŠSS modelis ir pakartotinio šildymo metodas (7 pav.).



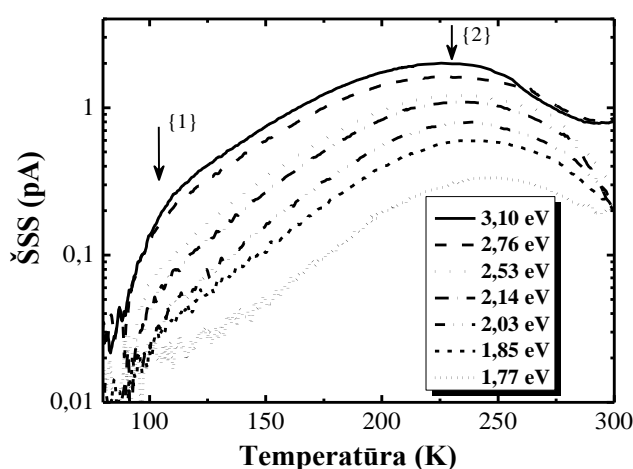
7 pav. Pakartotinio šildymo kreivės (a) ir pagavimo būsenų tankio priklausomybė nuo aktyvacijos energijos (b).

Iš pateiktų kreivių: 7 (a) pav. įvertintas būsenų pasiskirstymas. 7 (b) pav. histogramoje matyti tolydus būsenų pasiskirstymas su išplitusia aktyvacijos energija tarp 150 meV ir 450 meV su dviem išsiskiriančiais maksimumais ties 220 meV ir ties

380 meV. Šie rezultatai kiekybiškai sutampa su Gauso pasiskirstymo funkcijos parametrais: $\sigma_1 = 25$ meV ir $N_{11} = 1,2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $\sigma_2 = 90$ meV ir $N_{12} = 2,7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Šie du pagavimo lygmenys gali būti susieti su struktūriniais defektais, t.y. grandinių pabaigomis ar netolydžiais polimerų sluoksniais.

Todėl tradiciniu būdu gautos ŠSS kreivės taip pat buvo modeliuotos, įvedant erdvinį būsenų pasiskirstymą. Nustatyti parametrai sutampa su anksčiau aptartais.

Siekiant ištirti ŠSS spektro savybes, polimeriniai bandiniai buvo žadinami skirtingo pločio spektrų šviesa (8 pav.), kintant filtrų trumpabangio pralaidumo kraštui nuo 400 nm (3,10 eV) iki 700 nm (1,77 eV).



8 pav. ŠSS kreivių priklausomybės nuo žadinamos šviesos spektro pločio. Rodyklės parodo ŠSS maksimumo vietą.

Stebėtų maksimumų amplitudės dėl išlaisvinto krūvio ir jų padėtys yra įtakotos optinio sužadavimo. Jos pradeda išsotinti, kai kvanto energija pasiekia draustinės juostos kraštą. Platus ŠSS spektras atskleidžia platų energetinių būsenų pasiskirstymą. Didinant žadinamos šviesos spektro plotį, kreivės plokštėja ir maksimumo pozicija slenkasi į mažesniųjų energijų pusę, kas lemia aktyvacijos energijos mažėjimą. Įvertintos aktyvacijos energijų vertės, kurios siekia 0,22 meV ir 0,40 meV „gilch“, bei 0,28 meV - „sulfinyl“ būdu sintezuotuose polimeruose demonstruoja krūvio pernašą, vykstant šokavimui per būsenas. Mažesnės aktyvacijos energijos vertės gautos „sulfinyl“ būdu sintetintuose polimeruose rodo, jog nors abu polimerai turi vienodą monomerinę struktūrą, tačiau jų defektinės būsenos skirtingos.

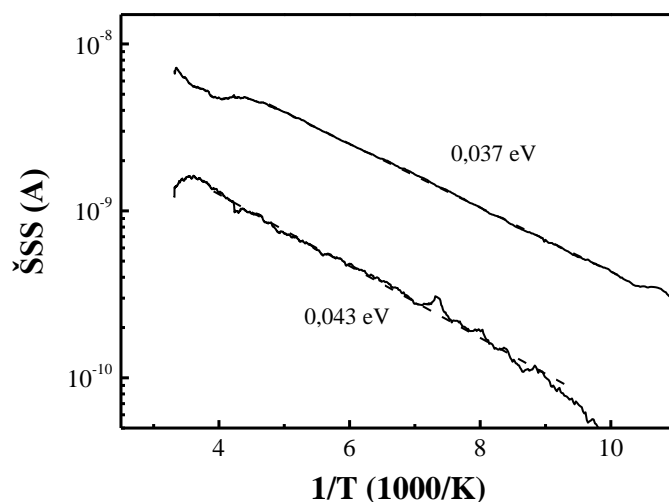
Gaudyklių būsenų pasiskirstymas nuo pridėto išorinio elektrinio lauko parodė, kad didėjantis elektrinis laukas mažina aktyvacijos energiją. Tai gali būti paaiškinta, jog

stipresnis elektrinis laukas iškreipia energetinius lygmenis, energizuoja krūvininkus ir jie lengviau gali pabėgti iš pagavimo būsenų ir iš potencinių duobių juostoje. Be to elektrinis laukas pagerina krūvininkų pernašos sąlygas iš kontaktų. Kadangi polimerai pasižymi energetine netvarka, tai energijos juostų kraštai taip pat turi potencialinį reljefą. Todėl stipriai jaučiama elektrinio lauko įtaka.

Trečio skyriaus ketvirtoje dalyje buvo tiriamos optinės ir elektrinės krūvio pernašos bei pagavos DNR:PEDT-PSS plonųjų sluoksnių savybės.

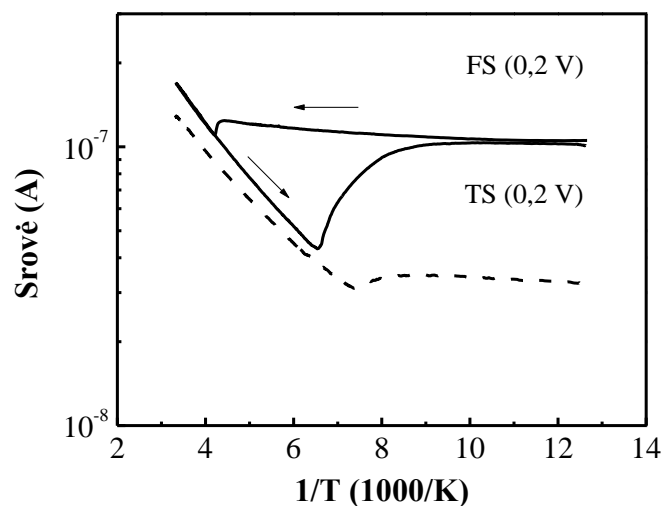
Tirtų polimerinių bandinių savitasis laidis kambario temperatūroje siekė $(1 - 5) \times 10^{-10} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, jų voltamperinės charakteristikos buvo tiesinės ir simetrinės iki pat skystojo azoto temperatūros. Elektrinio laidumo šiluminės aktyvacijos energija arti kambario temperatūros siekė 0,033 eV, nepriklausomai nuo prijungtos įtampos.

Šiluma skatinamų srovių metodu parodyta (9 pav.), jog medžiagoje krūvininkai pagaunami sekliomis gaudyklėmis, tačiau jų įtaka menka, nes vyksta sparti šviesos generuotų krūvininkų rekombinacija. Taip pat apskaičiuotos aktyvacijų energijų vertės gali atspindėti krūvio pernašos lygmenų išplitimą.



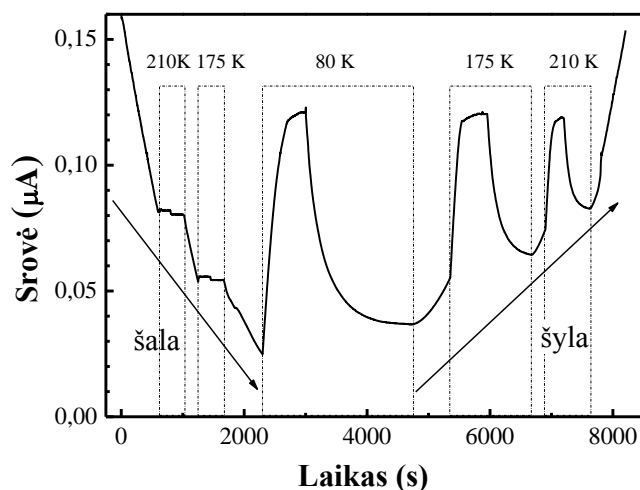
9 pav. ŠSS kreivės dviejuose bandiniuose išmatuotos po sužadavimo šviesa. Punktyrine linija pavaizduota eksperimentinių rezultatų aproksimacija Arenijaus skalėje.

Esant pastoviam bandinių žadinimui šviesa, kurios bangų ilgis buvo ~500 nm – 800 nm, 140 K – 240 K temperatūrų intervale pastebėtas fotolaidumo temperatūrinis bistabilumas (10 pav.). T. y., šaldant apšviestus bandinius žemesnėje kaip 140 K – 160 K temperatūroje, fotosrovė gerokai išauga, o šildomi jie iki 230 K – 240 K išlaiko padidėjusį fotolaidumą.



10 pav. Temperatūrinės fotosrovės priklausomybės (FS – fotosrovė ištisinė linija) bandinį šaldant ir šildant. Tamsinė srovė (TS) pavaizduota punktyrine linija.

Srovės kitimas, keičiant temperatūrą ir apšviečiant bei vėl užtemdant bandinį, pateiktas 11 pav. Temperatūra buvo stabilizuota ties 210 ir 175 K (bistabilios „kilpos“ viduje) bei ties 80 K. Šiuose taškuose bandiniai buvo sužadunami šviesa. Šaldant kilpos taškuose fotojautrumas išlieka mažas. Žemesnėje temperatūroje jis padidėja ženkliai, be to tokios pat vertės pasiekia ir šildant bandinį.



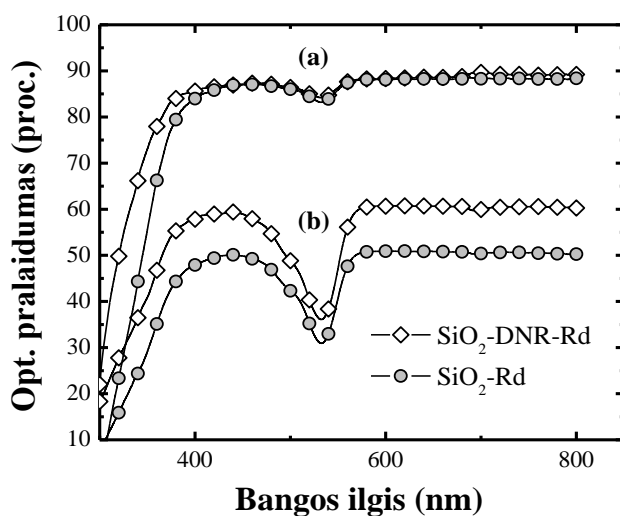
11 pav. Srovės kitimas keičiant temperatūrą ir žadinant šviesa. Temperatūra stabilizuojama 210 K, 175 K ir 80 K temperatūrose, kaip vaizduoja punktyrinės linijos. Šiuose taškuose bandinys sužadinamas balta 100 W halogeninės lempos šviesa.

Nestabilus fotolaidumas gali būti susijęs su šviesa indukuotais bandinio struktūros pakitimais, įtakojančiais fotosrovės padidėjimą žemose temperatūrose. Jį gali lemti keletas mechanizmų. Pirmą, žinoma, kad PEDT-PSS pasižymi anizotropiniu laidumu.

Gali būti, jog šildant ir šaldant polimerinę medžiagą skiriasi pernašos mechanizmo pokyčio temperatūros. Tai gali lemti šviesa indukuoti pernašos būsenų tankio pokyčiai dėl užpildymo krūvininkais.

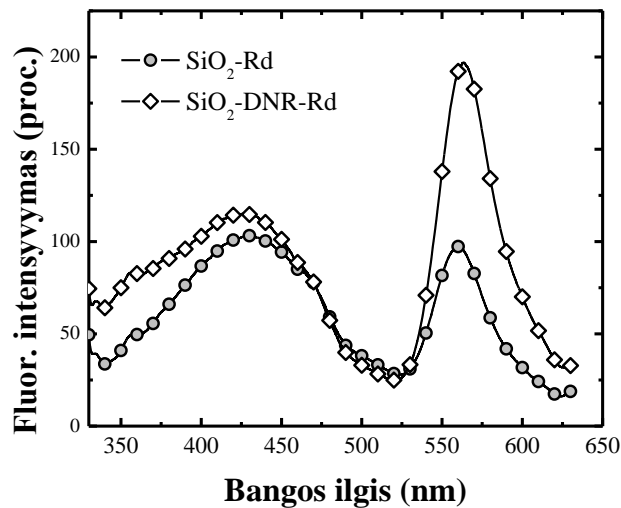
Trečio skyriaus penktojoje dalyje pristatomos hibridinio komplekso, sudaryto iš funkcionuotų DNR molekulių, silikagelio ir rodamino dažų, tiesinės ir netiesinės optinės savybės, siekiant išsiaiškinti DNR bio-molekulių įtaką joms.

Tiesinės optinės savybės charakterizuotos, matuojant optinio pralaidumo ir fluorescencijos spektrus. Optinio pralaidumo matavimai buvo atlikti nuo 300 nm iki 800 nm spektro pločio ribose (12 pav.).



12 pav. Optinio pralaidumo spektrai, (a) maža rodamino dažų koncentracija – 0.007 % ir (b) didelė dažų koncentracija – 0.060 %. Taip pat stebima DNR molekulių įtaka.

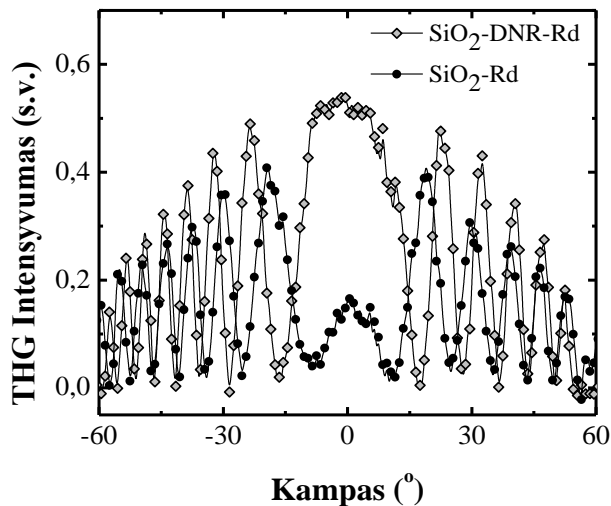
Optinio pralaidumo spektre stebimas sugerties maksimumas ties 532 nm patvirtina rodamino molekulių homogeninį pasiskirstymą silikagelio matricijoje. Didėjant dažo koncentracijai pralaidumas mažėja, tačiau įterpus DNR molekulių, tačiau nepakeitus medžiagos kiekio, stebimas pagerėjimas. Kai dažų koncentracija maža, molekulės būna DNR grioveluose, o didėjant koncentracijai, jos pradeda sąveikauti su surfaktanto oksietileno grupe. Taip pat, įterpus DNR, dažų molekulės pasiskirsto tarp micelės kamieno ir griovelio, taip išvengiant jų susikaupimo, kas lemia didesnę medžiagos homogeniškumą pasiskirsčiusioje matricijoje. Dėl tos pačios priežasties stebimas ir fluorescencijos sustiprėjimas 13 pav.



13 pav. Bandinių fluorescencijos spektrai medžiagoje turinčiose DNR molekulių ir be jų. Žadinimas vyko ties 524 nm.

Daugeliu atveju dažai veikia kaip fluorescencijos žymeklis bio-molekulėse ir gali veikti per kovalentinius ir nekovalentinius ryšius. Fluorescencijos smailė, matoma visuose bandiniuose ties 425 nm, yra susijusi su kompleksiniu surfaktanto ir dažų molekulės susijungimu.

Siekiant iširti DNR bio-molekulių įtaką netiesinėms optinėms savybėms, buvo atlikti trečios harmonikos generavimo (THG) Meikerio juostų metodu [6] matavimai. Gautos kreivės pavaizduotos 14 pav.

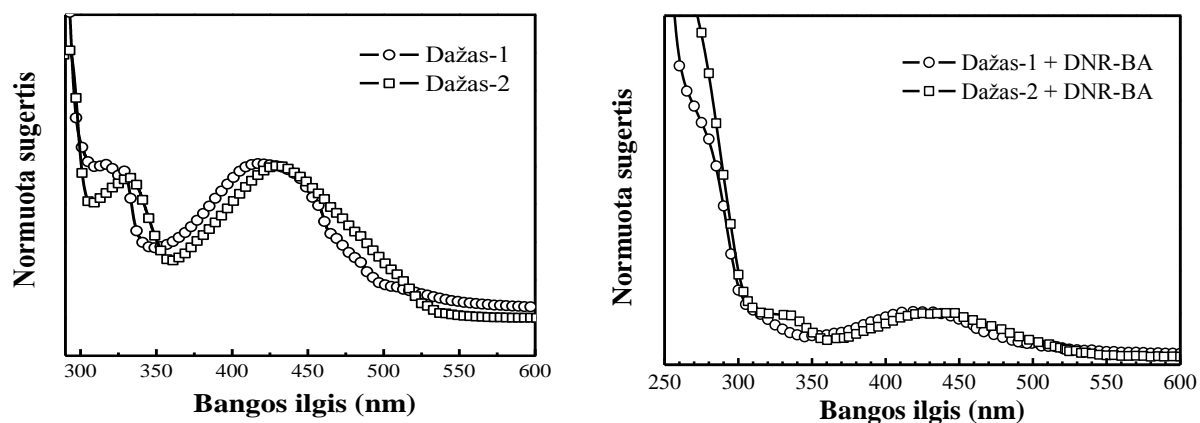


14 pav. THG Meikerio juostų intensyvumo priklausomybė nuo šviesos kritimo kampo į bandinį, medžiagoje turinčioje DNR molekulių ir be jų.

Iš šių vadinamųjų Meikerio juostų apskaičiuotas trečios eilės netiesinis jautris, kuris buvo 3 kartus didesnis ($\chi_{elec}^{(3)} = 12,5 \times 10^{-22} \text{ m}^2/\text{V}^2$) bandinyje su įterptomis DNR molekulėmis nei be jų ($\chi_{elec}^{(3)} = 5,6 \times 10^{-22} \text{ m}^2/\text{V}^2$). Netiesinio optinio signalo padidėjimas siejamas su pagerėjusia krūvio pernaša ir smarkiai poliarizuotų π -konjuguotų elektronų buvimu DNR molekulėse.

Trečio skyriaus šeštoje dalyje pristatomos DNR bio-molekulių ir naujų kationinių surfaktantų netiesinės optinės savybės ir jų pritaikymo galimybės, išplečiant tinkamų tirpiklių pasirinkimą, gaminant medžiagas skirtas panaudoti fotonikoje.

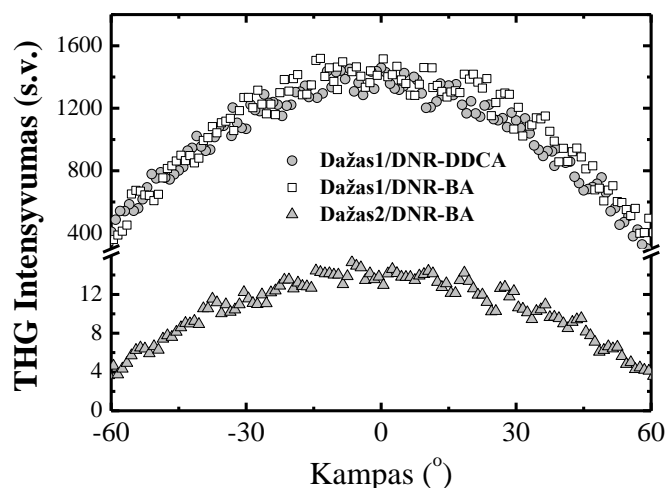
Pasirinkti benzalkonio chlorido (BA) ir didecildimetilamonio chlorido (DDCA) junginiai. Tyrimams atlikti buvo paruošti DNR kompleksai su azoto grupę turinčiais dažais t.y. 4-(9H-carbazol-3-ilazo)-3-chloro-N,N-dihidroksi-anilinas (dažas-1) ir 4-(9H-carbazol-3-ilazo)-N-tiazol-2-il-benzenesulfonamidas (dažas-2). Pasirinkti du skirtingi dažai, tikintis skirtingų medžiagos netiesinių optinių parametrų. Dažų ir dažų su DNR kompleksu sugerties spektrai parodyti 15 pav.



15 pav. Dažų ir dažų su DNR kompleksais sugerties spektrai.

Kairėje matome dažų, ištirpintų dioksane, spektrines charakteristikas. Dešinėje pateikta dažų ir DNR-BA kompleksų charakteristikos. Abiejuose paveiksluose nestebimas esminis spektro pokytis, tačiau matomas nežymus poslinkis į ilgesnių bangų pusę – apie 5 nm. Abiem atvejais stebima pagrindinės sugerties smailės nedidelis paplatėjimas. Nepaisant to, DNR kompleksas beveik nepakeičia naudotų dažų sugerties.

Trečios harmonikos generacijos būdu gautos Meikerio juostos pavaizduotos 16 pav.



16 pav. THG Meikero juostų intensyvumo priklausomybė nuo šviesos kritimo kampo į bandinį, esant skirtingiems surfaktantams ir dažams.

Dviem skirtingais metodais apskaičiuotos netiesinio trečios eilės optinio jautrio $\chi_{elec}^{(3)}$ vertės pateiktos 1 lentelėje.

1 lentelė. $\chi_{elec}^{(3)}$ verčių palyginimas skirtinguose bandiniuose.

Modelis Bandinys	<i>Rentjes</i> [7] $\chi_{elec}^{(3)} (\times 10^{-21} m^2 V^2)$	<i>Kajzar</i> [8] $\chi_{elec}^{(3)} (\times 10^{-21} m^2 V^2)$
Fused Silica	0,2	
Dažas-1/DNR-DDCA	$17,0 \pm 1,9$	$15,0 \pm 1,0$
Dažas-1/DNR-BA	$19,0 \pm 1,8$	$17,0 \pm 0,9$
Dažas-2/DNR-BA	$1,9 \pm 0,2$	$1,8 \pm 0,1$

Apskaičiuotos $\chi_{elec}^{(3)}$ vertės skiriasi dėl skirtingos dažų akceptorius grupės. Skirtingų surfaktantų įtaka netiesinėms optinėms savybėms paklaidų ribose sutampa. Tai reiškia, kad nepastebėta skirtumų tarp netiesinio optinio jautrio verčių, kurios gali būti įtakotos surfaktanto prigimties.

Pagrindiniai rezultatai ir išvados

1. Nustatyta išreikšta krūvininkų judrio priklausomybė nuo polinių molekulių erdvinės orientacijos naujoje polimerinėje poli(p-fenilvinileno) medžiagoje, susintetintoje siekiant pademonstruoti galimybę pagerinti saulės energijos konversijos efektyvumą, erdviškai išskiriant šviesa generuotas krūvininkų poras vidiniame medžiagos elektriniame lauke. Parodyta, jog vidinis elektrinis laukas medžiagoje, priklausomai nuo jo krypties, sąlygoja judrio kitimą iki 3 – 4 kartų. Atlikus bandinių

orientaciją tiesiogine kryptimi, pademonstruotas iki 40 proc. didesnis išorinis kvantinis našumas susietas su judrio didėjimu.

2. P3HT:PCBM bandiniuose išmatuotos voltamperinės charakteristikos, nustatytas 3,7 proc. konversijos koeficientas ir užpildos faktorius iki 68 proc. Pademonstruota efektyvi krūvininkų pagavos įtaka pernašos savybėms. Nustatytos pagavimo būsenų aktyvacijos energijos lygios 0,62 eV, o jų tankis siekia $10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Toks sąlyginai didelis būsenų tankis veikia kaip pernašos būsenos, ribojančios krūvininkų judrį. Atlikta skaitmeninė duomenų analizė, įskaičiuojant krūvininkų šiluminę generaciją iš gaudyklių ir judrio kitimą, taikant Gauso netvarkos modelį. Judrio parametrai, nustatyti ŠSS metodu ir gautieji iš tiesioginių judrio matavimų, sutampa, kas parodo, kad krūvininkų pagavimas yra vienas iš pagrindinių veiksnių nusakančių judrio elgseną.

3. Ištirtos šiluma skatinamųjų srovių priklausomybės nuo šviesa žadinamo spektro pločio ir pridėto elektrinio lauko. Pademonstruotas Gauso funkcijos pavidalo gaudyklių pasiskirstymas dviem skirtingais būdais sintezuotuose polimeruose. Aktyvacijos energijos „gilch“ būdu sintezuotoje medžiagoje siekia 0,22 eV ir 0,40eV, o „sulfanyl“ būdu 0,28 eV. Mažesnė aktyvacijos energija sietina su skirtingų gaudyklių būsenų susidarymu medžiagose. Keičiant sužadavimo spektrą, šiluminės aktyvacijos energijos vertės keičiasi dėl skirtingo būsenų užpildymo. Didesnis pridėtas elektrinis laukas sumažina krūvininkų aktyvacijos energiją dėl sumažėjusio potencialo barjero aukščio.

4. Ištirtos bio-organinių bandinių DNR-PEDT:PPS voltamperinės charakteristikos. Nustatytas elektrinis laidis, kuris siekia $(1 \div 5) \times 10^{-10} \text{ } \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Tamsinio laidumo šiluminė aktyvacijos energija kambario temperatūroje siekia 0,033 eV ir nepriklauso nuo pridėto elektrinio lauko. Šiluma skatinamųjų srovių metodu pademonstruota silpnai išreikšta krūvininkų pagava, kurią lemia sparti šviesa generuotų krūvininkų rekombinacija ir pakartotinė pagava. Identifikuota „bistabili“ fotolaidumo elgsena žemiau kambario temperatūros, esant pastoviam šviesos žadinimui. Šis reiškinys gali būti nulemtas šviesa indukuotų bandinio morfologinių pakitimų ir kintančių krūvio pernašos sąlygų.

5. Ištirtos DNR-SiO₂-Rd medžiagų tiesinės ir netiesinės optinės savybės. Bandiniai su įterptais DNR molekuliniais kompleksais parodė nuo 5 proc. iki 15 proc. didesnę optinę pralaidumą, priklausomai nuo dažų koncentracijos ir efektyvesnę fluorescenciją.

Didžiausias trečios eilės netiesinis jautris buvo stebėtas bandiniuose su įterptomis DNR molekulėmis. Jų jautris iki 3 kartų didesnis nei medžiagų be DNR.

6. Trijų skirtingų bandinių serijos (dažas-1/DNR-DDCA, dažas-1/DNR-BA, dažas-2/DNR-BA) netiesinės optinės savybės buvo charakterizuotos taikant antros ir trečios harmonikų generavimą medžiagoje, naudojant Meikerio juostų metodą. Stebėti labai maži antros eilės netiesiniai optiniai jautriai, 0,011 pm/V ir 0,003 pm/V skirtingų dažų atveju. Įvertinus trečios eilės netiesinį optinį jautrį, jo vertės paklaidų ribose sutampa su abiejų surfaktantų atvejais. Tai parodo, kad tirtieji surfaktantai nepakeičia netiesinių optinių savybių.

Publikacijų, įtrauktų į disertaciją, sąrašas:

- A1. C. Sentein, L. Rocha, A. Apostoluk, P. Raimond, I. Duysens, I. Van Severen, T. Cleij, L. Lutsen, D. Vanderzande, V. Kažukauskas, M. Pranaitis, V. Čyras, Evidence of the improvement of photovoltaic efficiency by polar molecule orientation in a new semiconducting polymer. // *Sol. Energ. Mat. Sol. C.* 91 1816–1824 (2007).
- A2. V. Kažukauskas, V. Čyras, M. Pranaitis, A. Apostoluk, L. Rocha, L. Sicot, P. Raimond, C. Sentein. Influence of polar molecular chain orientation on optical and carrier transport properties of polymer blends // *Org. Electron.* 8 21 – 28 (2007).
- A3. V. Kažukauskas, V. Čyras, M. Pranaitis, C. Sentein, L. Rocha, P. Raimond, I. Duysens, I. Van Severen, T. Cleij, L. Lutsen, D. Vanderzande. Improvement of photovoltaic efficiency by polar molecule orientation in a newly developed semiconducting polymer // *Thin solid films.* 516 24 8963-8968 (2008).
- A4. V. Kažukauskas, M. Pranaitis, L. Sicot, F. Kajzar. Negative mobility dependence on electric field in poly(3-alkylthiophenes) evidenced by the charge extraction by linearly increasing voltage method // *Thin Solid Films* 516 8988–8992 (2008).
- A5. V. Kažukauskas, M. Pranaitis, A. Arlauskas, O. Krupka, F. Kajzar, Z. Essaidi, B. Sahraoui. Electrical and optical properties of thin films of DNA:PEDOT // *Optical materials.* 32 12 1629-1632 (2010).
- A6. V. Kažukauskas, A. Andrius, M. Pranaitis, M. Glatthaar, A. Hinsch. Charge Transport and Trapping in Bulk-Heterojunction Solar Cells // *Journal of nanoscience and nanotechnology.* 10 2 1376-1380 (2010).

- A7. H. El Ouazzani, K. Iliopoulos, M. Pranaitis, O. Krupka, V. Smokal, A. Kolendo, B. Sahraoui, Second- and Third-Order Nonlinearities of Novel Push-Pull Azobenzene Polymers // Journal of physical chemistry B 115 1944-1949 (2011).
- A8. M. Levichkova, D. Wynands, A. A. Levin, K. Walzer, D. Hildebrandt, M. Pfeiffer, V. Janonis, M. Pranaitis, V. Kažukauskas, K. Leo, M. Riede. Dicyanovinyl sexithiophene as donor material in organic planar heterojunction solar cells: Morphological, optical, and electrical properties // Organic Electronics. 12, 2243–2252 (2011).
- A9. V. Kažukauskas, M. Pranaitis. Trap distribution near the energy band gap edge in MDMO-PPV // Functional materials letters. 4 1 53-56 (2011).
- A10. M. Pranaitis, V. Janonis, A. Sakavičius, V. Kažukauskas. Determination of the charge trap energy distribution in conjugated polymer MDMO-PPV // Semiconductor science and technology. 26 8 085021 (2011).
- A11. B. Sahraoui, M. Pranaitis, K. Iliopoulos, M. Mihaly, A. F. Comanescu, M. Moldoveanu, I. Rau, V. Kažukauskas. Enhancement of linear and nonlinear optical properties of deoxyribonucleic acid-silica thin films doped with rhodamine // Applied physics letters. 99, 24, 243304 (2011).
- A12. B. Sahraoui, M. Pranaitis, D. Gindre, J. Niziol, V. Kažukauskas. Opportunities of deoxyribonucleic acid complexes composites for nonlinear optical applications // Journal of applied physics. 110, 8, 083117 (2011).

Rezultatų, asmeniškai pristatytų konferencijose ir vasaros mokyklose, sąrašas:

- C1. M. Pranaitis, M. Mihaly, A. Comanescu, M. Moldoveanu, I. Rau K. Iliopoulos, J. Niziol, V. Kažukauskas, B. Sahraoui. Stendinis pranešimas. Linear and nonlinear optical properties of functionalized DNA complexes. Second French-Polish, Workshop on Organic Electronics and Nanophotonics, Anžė, Prancūzija, 2011.
- C2. M. Pranaitis, V. Kažukauskas, B. Sahraoui, J. Niziol, O. Krupka. Žodinis pranešimas. Krūvio pernašos ir netiesinių optinių reiškinių analizė DNR kompleksuose skirtuose netiesinei optikai ir optoelektronikai // Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai: pirmosios LMA Jaunųjų mokslininkų konferencijos pranešimų santraukos, Vilnius, 2011.

- C3. M. Pranaitis, M. Mihaly, A. Comanescu, M. Moldoveanu, I. Rau K. Iliopoulos, V. Kažukauskas, B. Sahraoui. Stendinis pranešimas. Linear, Nonlinear optical properties of DNA/Rhodamine-Silica thin films. 12th International Conference Electronic and Related Properties of Organic Systems, Vilnius, 2011.
- C4. M. Pranaitis, V. Kažukauskas. Stendinis pranešimas. Impact of the Gaussian distribution of states on thermally stimulated current spectra in MDMO-PPV, 12th International Conference Electronic and Related Properties of Organic Systems, Vilnius, 2011.
- C5. 6th International Summer School New Frontiers in Optical Technologies, Stendinis pranešimas, Tamperè, Suomija, 2011.
- C6. M. Pranaitis, V. Kažukauskas, A. Arlauskas. Žodinis pranešimas. Distribution of charge carrier traps at the band gap edges in MDMO-PPV. 3rd International Symposium on Flexible Organic Electronics, Kalkidikèi, Graikija, 2010.
- C7. M. Pranaitis, V. Kažukauskas, O. Krupka, F. Kajzar, B. Sahraoui. Stendinis pranešimas. Temperature dependent photo-conductivity of DNA:PEDOT thin films. 3rd International Symposium on Flexible Organic Electronics, Kalkidikèi, Graikija, 2010.
- C8. M. Pranaitis, V. Kažukauskas, A. Arlauskas. Žodinis pranešimas. Charge carrier transport in non-homogeneous MDMO-PPV polymer. 14th International Symposium on Ultrafast Phenomena in Semiconductors (14 UFPS). Vilnius, 2010.
- C9. V. Kažukauskas, M. Pranaitis, O. Krupka, F. Kajzar, B. Sahraoui. Stendinis pranešimas. Photoelectrical behaviour of DNA:PEDOT functionalised films. 14th International Symposium on Ultrafast Phenomena in Semiconductors (14 UFPS). Vilnius, 2010.
- C10. M. Pranaitis, V. Kažukauskas, A. Arlauskas. Investigation of charge trapping in disordered organic materials. Stendinis pranešimas. 38-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija. Vilniaus universitetas, 2009.
- C11. Training courses “Organic Electronic” Technion - Israel Institute of Technology, Žodinis pranešimas. Haifa, Izraelis, 2008.

Literatūra

- [1] V. Kažukauskas, V. Čyras, M. Pranaitis, C. Sentein, L. Rocha, P. Raimond, I. Duysens, I. Van Severen, T. Cleij, L. Lutsen and D. Vanderzande. *Sol. En. Mater. Sol. Cells*, **91**, 19 1816-1824 (2007).
- [2] G. Juška, K. Arlauskas, M. Viliūnas and J. Kocka. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 4946 (2000).
- [3] C. Fiorini, F. Charra, J. M. Nunzi, P. Raimond, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**, 1984-2003, (1997).
- [4] H. Bässler, *Phys. Stat. Sol. B*, **175**, 15 (1993).
- [5] R. R. Haering and E. N. Adams, *Phys. Rev.* **117**, 451-54 (1960).
- [6] F. Kajzar and J. Messier, *Phys. Rev. A*, **32**, 2352 (1985).
- [7] J. F. Reintjes, *Nonlinear Optical Parametric Processes in Liquids and Gases* (Academic, Orlando, 1984).
- [8] F. Kajzar, J. Messier and C. Rosilio, *J. Appl. Phys.*, **60**, 3040 (1986).

Informacija apie autorių

Vardas Pavardė	Mindaugas Pranaitis
Gimimo data ir vieta	1984 m. gegužės 3 d. Raseinių r. Viduklė, Lietuva
Adresas	Volungės g. 18-13, Vilnius, Lietuva
Elektroninis paštas	mindaugas.pranaitis@ff.stud.vu.lt
Išsilavinimas	2002 m. Viduklės S. Stanevičiaus gimnazija (Raseinių r.) 2002 – 2006 m. Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas gautas bakalauro laipsnis 2006 – 2008 m. Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas gautas magistro laipsnis 2008 – 2012 m. Vilniaus universitetas doktorantūros studijos
Darbo patirtis	2005 – 2008 m. Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, inžinierius 2008 m. – iki dabar Vilniaus universitetas, Taikomųjų mokslų institutas, jaunesnysis mokslo darbuotojas
Specializacija	Fotoelektriniai krūvio pernašos ir pagavos tyrimai organinėse bioorganinėse medžiagose skirtose optoelektronikai
Stażuotės, vasaros mokyklos	2011 m. Vasaros mokykla “New Frontiers in Optical Technologies”, Suomija 2010 m. ir 2011 m. Stažuotės Anžė universiteto mokslo ir molekulinių technologijų institute, Prancūzija 2009 m. Mokymo kursai “Organic Electronics”, Izraelis.
Publikacijos	~30 straipsnių žurnaluose, įtrauktuose į ISI duomenų bazę, ~20 pranešimų konferencijose