

Od kilkunastu lat trwają badania nad wykorzystaniem molekuł organicznych w urządzeniach (opto)elektronicznych takich jak np. organiczne diody luminescencyjne (OLED) czy organiczne ogniwa słoneczne (OPVC). W prowadzonych pracach, metalofalocyjaniny (MPc) cieszą się dużym zainteresowaniem ze względu na ich stabilność termiczną i chemiczną oraz różnorodność ich właściwości w zależności od koordynowanego metalu i chemicznego składu grup funkcjonalnych ligandu. Duży współczynnik absorpcji światła z zakresu promieniowania słonecznego czyni je atrakcyjnymi kandydatami na materiały aktywne w organicznych ogniwach słonecznych. Urządzenia te ze względu na swą lekkość oraz dużą elastyczność mogą znacznie powiększyć liczbę elementów zasilanych energią słoneczną. W OPVC materiał organiczny znajduje się pomiędzy dwoma elektrodami. Z tego powodu badania adsorpcji MPc na powierzchniach metali są istotne dla dalszego rozwoju optoelektroniki.

Wynikiem adsorpcji molekuł organicznych na powierzchni metalu jest powstanie interfazy. Definiuje się ją jako warstwę cząsteczek będącą w bezpośrednim kontakcie z metalem. Oddziaływania pomiędzy obiektami skutkują powstaniem specyficznych pasm elektronowych i decydują o geometrii formowanych przez molekuły struktur. Cechy te wpływają na wydajność organicznych urządzeń optoelektronicznych. Z przeprowadzonych do tej pory badań (zarówno doświadczalnych jak i teoretycznych) wynika, że liczne procesy są odpowiedzialne za elektronowe właściwości interfazy. Procesami tymi są między innymi: transfer ładunku, tworzenie się wiązań chemicznych, lateralne przemieszczenie ładunku powierzchniowego metalu (ang. Pillow effect). Jednakże, do tej pory nie powstał uniwersalny model opisujący wszystkie zjawiska zachodzące w metalo – organicznych układach.

W ramach projektu zostanie eksperymentalnie wyznaczona zależność właściwości elektronowych i strukturalnych interfazy pomiędzy warstwą złożoną z ftalocyjaniny z kobaltem (CoPc – donor) i fluorowanej ftalocyjaniny z miedzią (F₁₆CuPc – akceptor), a powierzchnią srebra w funkcji koncentracji molekuł jednego typu w warstwie molekularnej. Otrzymana zależność pozwoli na zaprojektowanie i wykonywanie optoelektronicznych urządzeń o optymalnych parametrach. Do badań zostaną użyte komplementarne metody doświadczalne fizyki powierzchni ciała stałego. Spektroskopie fotoelektronów wzbudzanych promieniowaniem rentgenowskim i ultrafioletowym (odpowiednio: XPS i UPS) pozwolą, z jednej strony określić występujące oddziaływania molekula-podłoże oraz molekula- molekula, a z drugiej strony pozwolą na wyznaczenie energetycznego ułożenia stanów elektronowych w poszczególnych układach. Do badań strukturalnych zostaną wykorzystane techniki dyfrakcji elektronów niskiej energii (LEED) i skaningowa mikroskopia tunelowa (STM). Pierwsza z metod pozwoli określić geometrię dalekozasięgowych uporządkowanych struktur formowanych przez warstwę ftalocyjanin na powierzchni srebra. STM to instrument pozywający badać topografię próbki z atomową rozdzielczością. Badania przy użyciu STMu umożliwią dokładne zlokalizowanie i identyfikację konkretnej molekuly (CoPc/F₁₆CuPc) w warstwie oraz jej ułożenie, a tym samym pozwolą nam rozszyfrować geometrię formowanych struktur. Wszystkie wymienione wyżej techniki badawcze są powszechnie stosowane na świecie do charakteryzacji interfazy pomiędzy warstwą molekuł organicznych, a powierzchnią metalu. W projekcie dodatkowo zostanie wykorzystana technika pomiaru zmian pracy wyjścia próbki metodą Andersona (diodową). Pomiar zmian pracy wyjścia pozwoli uzyskać informację o tworzonem w interfacie dipolu elektrycznym. Możliwe będzie także określenie jak dana próbka oddziałuje z niskoenergetyczną wiązką elektronową. Zebranie i porównanie wyników otrzymanych różnymi technikami pozwoli na określenie strukturalnych i elektronowych właściwości układu CoPc-F₁₆CuPc/Ag(100) jako funkcji składu warstwy molekularnej.