

Rezumat raport stiintific
privind implementarea proiectului in Etapa I
perioada ianuarie – decembrie 2012

Carbon quantum dots: exploring a new concept for next generation optoelectronic devices -
http://www.imt.ro/cqd_opto

CONTRACTOR

Institutul National de Cercetare-Dezvoltare
pentru Microtehnologie
IMT-Bucuresti

UNITATEA CONTRACTANTA

Unitatea Executiva pentru Finantarea
Invatamantului Superior,
a Cercetarii, Dezvoltarii si Inovarii UEFISCDI

Cod proiect: : PNII-ID-PCCE-2011-2-0069

Contract de finantare nr.8/11.06.2012

INSTITUTII PARTENERE ÎN PROIECT:

CO - Institutul National de Cercetare -Dezvoltare pentru Microtehnologie - IMT Bucuresti *Centrul de Nanotehnologie*

P1 - Institutul National de Cercetare -Dezvoltare pentru Microtehnologie - IMT Bucuresti *MIMOMEMS*

P2 - Universitatea Babes-Bolyai *Facultatea de Chimie si Inginerie Chimica*

P3 - Universitatea Babes-Bolyai *Facultatea de Fizica*

Obiectivul proiectului:

Investigarea potentialului nanocristalelor de carbon (CQD – carbon quantum dot) de a fi folosite ca materiale active in dispozitivele optoelectronice, cu precadere diode organice emitatoare de lumina (CQD-LED) si celule solare (CQD-PV). Pentru realizarea si optimizarea acestor dispozitive, proprietatile electronice, optice si de transport ale nanocristalelor de carbon pasivate cu diferiti polimeri vor fi studiate atat din punct de vedere teoretic cat si experimental.

Rezultate preconizate pentru aceasta etapa:

Obtinerea solutiilor coloidale de CQD (simple si pasivate cu PEG_{1500N}) cu dimensiuni de 4-5 nm si randamente cuantice de pana la 40%. Studiul proprietatilor optice si electronice ale acestor materiale prin metode spectroscopice (fotoluminescena, UV-vis) si electrochimice (determinarea nivelelor energetice HOMO-LUMO). Selectarea liganzilor necesari sintezei unor structuri noi de CQD.

Rezultate stiintifice obtinute:

1. Obtinerea si caracterizarea solutiilor coloidale de nanocristale de carbon simple si pasivate cu PEG_{1500N}.
2. Selectarea liganzilor necesari functionalizarii nanocristalelor de carbon si stabilirea strategiei de obtinere a noilor nanocristale de carbon cu aplicatii specifice in optoelectronica.
3. Calcule fenomenologice de tip tight binding (tb) si ab-initio pentru investigarea proprietatilor optice si electronice ale nanocristalelor de carbon.

1. Obtinerea si caracterizarea solutiilor coloidale de nanocristale de carbon simple si pasivate

Nanocristalele de carbon investigate au fost obtinute prin doua metode: ablatia grafitului si electroliza fibrelor de carbon. Materialele obtinute prin ablatie laser si pasivate cu diamina polietilen-glicolului (PEG_{1500N}), (CQD1) (obtinute pentru comparatie si de la Universitatea din Clemson) prezinta randamente cuantice de fluorescena (QY – quantum yield) de $QY_{400} = 5.6\%$ si $QY_{440} = 4.1\%$ fata de Sulfatul de Chinina. Studiile spectroscopice, prezentate in Figura 1, pun in evidenta absorbtia in ultraviolet si albastru si emisia acestora in domeniul vizibil al spectrului electromagnetic, cu un maxim de emisie centrat la 495 nm pentru $\lambda_{ex} = 440\text{nm}$, si variatia emisiei cu lungimea de unda a luminii de excitare. Un comportament similar a fost observat si in cazul CQD obtinute electrolitic, cu exceptia maximului de emisie care este centrat la 510 nm pentru $\lambda_{ex} = 440\text{nm}$. Estimarea nivelelor energetice HOMO si LUMO pentru CQD1 a fost determinata prin masuratori de voltametrie ciclica, la -5.41 eV si respectiv -3.91 eV . Din punct de vedere morfologic, nu se observa diferente majore intre materiale obtinute prin cele doua metode, dimensiunile fiind in medie de 2 - 6 nm.

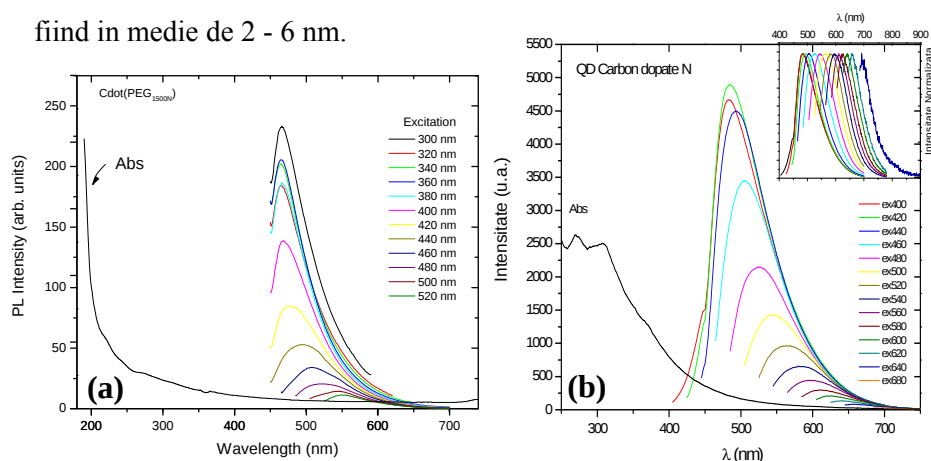


Figura 1. Spectre de absorbtie si fluorescena ale solutiilor de (a) CQD1 – λ_{ex} de la 440 la 560 nm cu un increment de 20 nm si (b) nanocristale de carbon obtinute electrochimic – λ_{ex} de la 400 la 660 nm cu increment de 20 nm.

2. Selectarea liganzilor necesari pasivarii nanocristalelor de carbon pentru obtinerea nanomaterialelor foto/electro-luminescente din componenta dispozitivelor optoelectronice, precum si stabilirea strategiei de obtinere a noilor nanocristale de carbon (CQD2).

In acest context se vor utiliza doua metode pentru pasivarea CQD: metoda „grafting to”, respectiv „grafting from”.

- pentru metoda “grafting to” se propune derivatizarea CQD deja pasivate cu polimeri de tipul PEG_{1500N} cu grupari G, urmarindu-se modificarea PL in functie de caracterul electron-donor sau acceptor al gruparii grefate G;
- pentru pasivare prin metoda „grafting from” se propune policondensarea Suzuki catalizata de Pd, respectiv derivatizarea suprafetei cu grupari aromatice si initierea reactiei de policondensare la suprafata.

3. Calcule fenomenologice de tip tight binding (tb) si ab-initio pentru investigarea proprietatilor optice si electronice ale nanocristalelor de carbon.

Pentru simularea interactiunii cu lumina a unui sistem de nano-dot-uri de carbon functionalizate a fost aleasa simularea clasica a dinamicii moleculare, cu forte empirice (LAMMPS) ce sunt capabile sa determine structura atomica a sistemelor cu mii si zeci de mii de atomi (Figura 2), si permite simularea tratamentelor termice suferite de dot-urile de carbon din timpul obtinerii lor.

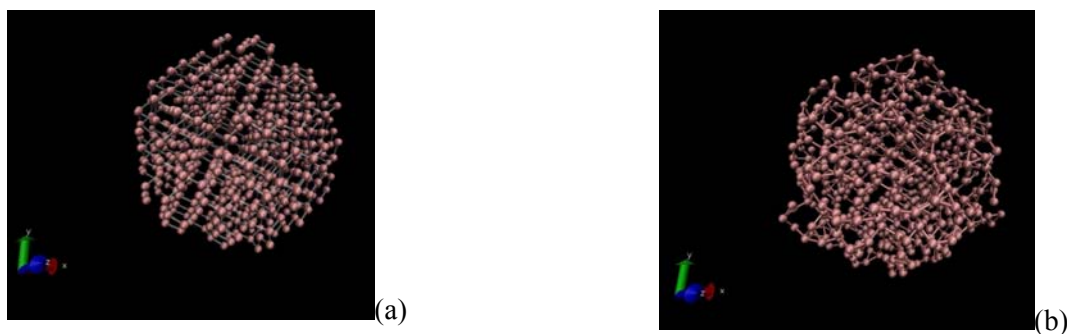


Figura 2. Nano-dot de Carbon sferic cu un diametru de 2 nm decupat din diamant inainte de tratamentul termic (a); Sfera de diamant de 2 nm dupa tratament termic la 2000K pentru 0.45 ns in termostatare de tip Berendsen (b).

Structura electronica a sistemelor cu dimensionalitate redusa s-a descris prin utilizarea aproximatiei tight-binding in spatiul real astfel:

- dezvoltarea unui cod de program care diagonalizeaza un hamiltonian de tip tight – binding pentru un caz 2-dimensional in care atomii au fost distribuiti intr-o retea cristalina patratica cu 16x16 ori 32x32 atomi, in care energia cinetica contine atat termeni on-site cat si parametrii de hopping intre vecinii de ordinul intai si ordinul doi;
- dezvoltarea unui cod de program care diagonalizeaza un hamiltonian care descrie o retea cristalina hexagonala corespunzatoare grafenei, urmandu-se ca sa se abordeze cazul unei retele cristaline 3-dimensional si a unei retele amorfe.