

Abstrakt

Analyzujeme námi navržený model fotogenerace volných nosičů náboje v π -konjugovaných polymerních materiálech se slabými mezimolekulárními interakcemi vycházející z Archipovova modelu. Zahrnuli jsme kvantové efekty ovlivňující vznik stavů spojených s přenosem náboje představující mezikrok při fotogeneraci volných nosičů náboje. Elektrostatická interakce mezi elektronem a dírou, stejně tak jako přenosové integrály, jsou spočteny kvantově-chemicky. Model jsme aplikovali na experimentální data závislosti fotogenerace volných nosičů náboje v poly[1-trimethylsilylfenyl,2-fenyl]acetylenu na intenzitě vnějšího elektrického pole. Podařilo se odstranit některé nedostatky předchozího modelu. Byli jsme schopni namodelovat experimentální data bez nutnosti rozdělení intervalu intenzit elektrických polí na několik oblastí, ve kterých bylo nutno prokládat experimentální data modelovými křivkami s různými fyzikálními parametry. Náš model je schopen popsat experimentální data v celém rozsahu intenzit elektrického pole pomocí jedné sady parametrů modelu. Dále se nám podařilo snížit počet parametrů modelu na tři.

Klíčová slova

π -konjugované polymery, fotogenerace nosičů náboje, fotovodivost