

На правах рукописи



Байбулова Галия Шафкатовна

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРОННЫЕ  
СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ СО-ПОЛИАРИЛЕНЭФИРКЕТОНОВ**

1.4.4. Физическая химия

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Уфа - 2024

Работа выполнена на кафедре физики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акумуллы».

**Научный руководитель:** кандидат физико-математических наук  
**Карамов Данфис Данисович**

**Официальные оппоненты:** **Тамеев Алексей Раисович**, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, главный научный сотрудник лаборатории электронных и фотонных процессов в полимерных наноматериалах

**Феськов Сергей Владимирович**, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный университет», ведущий научный сотрудник кафедры теоретической физики и волновых процессов

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет», г. Уфа

Защита диссертации состоится «19» сентября 2024 года в 14:00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.479.04 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» по адресу: 450008, г. Уфа, ул. К. Маркса, 12, email: ismagilovaas@yandex.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» и на сайте <https://uust.ru/>.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2024 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

д.ф.-м.н., доцент

Исмагилова Альбина Сабирьяновна

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### **Актуальность темы:**

Динамичное развитие электроники стимулирует спрос на новые функциональные материалы, которые являются триггером к модернизации существующих и созданию качественно новых технологий производства функциональных устройств. Полимеры все чаще используются в качестве функциональных материалов в компонентах электронной базы благодаря широким возможностям управления их свойствами путем синтеза и технологической гибкости. На сегодняшний день синтезировано колоссальное количество полимеров, отличающихся разнообразием химической структуры. Особое место в современном синтезе новых высокомолекулярных соединений отводится прогнозированию физических свойств на основе химической структуры полимера. Тем не менее, некоторые свойства материалов могут резко отличаться от прогнозируемых и установление взаимосвязи не всегда является тривиальной задачей.

К подобным материалам, в частности, относится класс несопряженных полимеров – полигетероарилены, которые обладают комплексом ценных свойств: высокой термической стабильностью, тепло- и химической стойкостью в сочетании с хорошими механическими характеристиками. Но в то же время, в тонких пленках данных полимеров были найдены условия, при которых они демонстрируют свойства резистивного переключения проводимости от диэлектрического в анизотропное проводящее состояние [1], что имеет потенциал для дальнейшего внедрения в прикладную сферу. Следует подчеркнуть, что высокая проводимость достигается без использования легирования и введения в полимерную матрицу каких-либо электропроводящих наполнителей. В результате уникального сочетания высокой металлической проводимости и оптической прозрачности в видимой областях спектра делает эти полимеры перспективными в качестве прозрачных электрически активных молекулярно-однородных материалов.

Термопластичные сополимеры полиариленэфиркетонов (со-ПАЭК) с кардофлуореновыми фрагментами являются многообещающим клеевым материалом для обеспечения электрического контакта между токосъемными проводниками и слоем прозрачных проводящих оксидов (ТСО) в контактной системе солнечного элемента [2]. Несмотря на обширные исследования в области кардоароматических полиэфиров, механизмы транспорта носителей заряда в структуре металл/со-ПАЭК/ТСО не достаточно изучены. Ранее в работах [3-4], отмечалось отсутствие очевидной корреляции между изменением концентрации функциональных групп в макромолекуле и термостимулированными токовыми явлениями в тонких пленках сополимеров полиариленэфиркетонов (со-ПАЭК) с изопропилиденовыми группами и вариацией содержания флуореновых или фталидных групп. Позднее в [5] было установлено, что в запрещенной зоне сополимеров с флуореновыми и фталидными группами существует 4 уровня ловушечных

состояний с разной энергией активации, для каждого вида сополимера. При этом их положение в зависимости от концентрации функциональных групп не существенно изменяется, но приводит к переносу энергии с одних центров на другие в спектрах испускания фотолюминесценции. При этом, вопрос влияния количественного содержания функциональных фрагментов в макромолекуле на изменение электропроводности и механизмов протекания тока в тонких пленках полимера остается дискуссионным.

**Целью диссертационной работы** являлось исследование физико-химических особенностей строения и электронных свойств сополимеров полиариленэфиркетонов в зависимости от содержания фталидных и флуореновых функциональных групп.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. теоретические исследования электронной структуры соединений модельных для со-ПАЭК (мономеры, димеры и тетрамеры) методами квантовой химии;

2. исследование оптических спектров со-ПАЭК при вариации изопропилиденовой и флуореновой групп;

3. исследование вольт-амперных характеристик металл/со-ПАЭК/ТСО при вариации изопропилиденовой и флуореновой групп полимера;

4. установление общих закономерностей в изменении электрофизических характеристик со-ПАЭК при вариации функциональных групп и их химической структурой.

#### **Научная новизна.**

- впервые интерпретировано немонотонное изменение электронных свойств со-полиариленэфиркетонов, основанное на гипотезе о различном строении функциональных центров в макромолекуле в зависимости от содержания функциональных групп в сополимере;

- показано, что уменьшение ширины запрещенной зоны со-полиариленэфиркетонов происходит при увеличении содержания функциональных групп от 0 до 35 % в химическом соединении;

- установлено, что изменение электрофизических свойств гетероструктуры на основе со-ПАЭК при изменении содержания флуореновых групп вызвано изменением подвижности, концентрации носителей заряда и потенциального барьера на границе раздела металл (полупроводник)/ со-ПАЭК;

- проведен теоретический анализ причин, приводящих к возникновению уникальных электрофизических свойств в тонких пленках полимерных диэлектриков, а также продемонстрирована определяющая роль структуры и состава используемого сополимера.

#### **Теоретическая и практическая значимость работы.**

Предложенный алгоритм сопоставления квантово-химических расчетов электронных свойств модельных соединений со-ПАЭК с электрофизическими свойствами тонких пленок полимера позволяет оценить

наиболее вероятную структуру локальных функциональных центров в макромолекуле при заданном содержании функциональных групп.

Результаты диссертационной работы позволяют оптимизировать работу по отбору химических соединений для обеспечения наилучшего электрического контакта между токосъемными проводниками и слоем прозрачных проводящих оксидов (ТСО) в контактной системе солнечного элемента.

**Методология и методы исследования.** Расчеты модельных соединений были проведены с помощью метода квантовой химии теории функционала плотности в приближении  $B3LYP/6-31+G(d)$ , реализованного в программе Firefly. В экспериментах были использованы методы исследования вольт-амперных характеристик и УФ-спектроскопии. Методики изготовления экспериментальных образцов: центрифугирование для получения тонких полимерных пленок на твердых стеклянных подложках и термодиффузионное напыление в вакууме для формирования металлических электродов.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Увеличение содержания (концентрации) флуореновых групп в сополиариленаэфиркетонах от 5 до 25% приводит к уменьшению разности энергий между нижней вакантной молекулярной орбиталью и верхней занятой МО.

2. Увеличение содержания (концентрации) флуореновых групп в сополиариленаэфиркетонах от 5 до 25% сопровождается немонотонным изменением электронных свойств, вызванное соответствующим изменением электронных параметров тонких пленок (подвижности, концентрации носителей заряда, высоты потенциального барьера на контакте металл/полимер, энергии Урбаха).

3. На электрофизические параметры тонких полимерных пленок влияет взаимное расположение функциональных групп полимера, которые формируют локальные центры, ответственные за транспорт носителей заряда.

**Достоверность полученных результатов** подтверждается применением стандартных программных продуктов для расчетов методами квантовой химии, использованием неоднократно апробированных экспериментальных методов и соответствием с известными литературными данными.

**Результаты диссертационного исследования использованы в проекте:** Грант РФФИ № 22-19-00535 «Изучение свойств гетероструктуры металл-прозрачный проводящий полимер-ТСО для создания инновационной токособирающей системы солнечного элемента» (руководитель Чеботарева А.Б.).

**Апробация работы.** Результаты исследования были представлены на конференциях различного уровня: Всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем», Яльчик 2012 г.; Международная школа-

конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», Уфа, 2011, 2012, 2013, 2021 гг.; VI Всероссийская научно-практическая конференция «Обратные задачи химии Памяти академика РАН Ю.Б. Монакова», Бирск 2011 г.; Всероссийская конференция «Фотоника органических и гибридных наноструктур», Черноголовка 2011 г.; IV Всероссийская конференция по наноматериалам НАНО-2011, Москва 2011; Всероссийская молодежная конференция «Актуальные проблемы нано- и микроэлектроники», Уфа 2012, 2014 гг.; Всероссийская научная конференция «Инновационный потенциал молодежной науки», Уфа 2012, 2013 гг.; Всероссийская молодежная конференция «Физика и химия наноразмерных систем», Екатеринбург 2012 г.; Всероссийская научно-практическая конференция «Математическое моделирование на основе методов Монте-Карло», Бирск 2013 г.; Всероссийская молодежная школа-конференция «Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул», г. Иваново 2013г.; V Всероссийская научно-методическая конференция «Проблемы современного физического образования», посвященная 100-летию открытия Уфимского Физического Института, Уфа 2019 г.; Двадцать шестая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых ВНКСФ-26, Уфа 2020 г.; I Всероссийская молодежная школа-конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании (ФМЦН-22)», посвященная 100-летию со дня рождения А.Д.Сахарова, Уфа 2022, 2023 гг.; 81 Международная научно-техническая конференция «Актуальные проблемы современной науки, техники и образования», г. Магнитогорск 2023 г. и др.

**Публикации.** По теме диссертации опубликована 31 работа, из которых 10 – научные статьи, в том числе: 2 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией РФ, 2 статьи в отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RCSI, Scopus, Web of Science), 6 статей в журналах, входящих в состав РИНЦ, 21 работа в трудах российских и международных научных конференций.

**Личный вклад автора.** Автором проведены квантово-химические расчеты, выполнен анализ результатов и их апробация. В указанных публикациях автор принимал участие в постановке задачи, обсуждении полученных результатов и оформлении работ. Диссертационная работа написана автором самостоятельно.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, трех глав, выводов и списка используемых источников. Общий объем работы составляет 169 страниц, в том числе 40 иллюстраций и 27 таблиц. Библиографический список состоит из 190 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность темы исследования, сформулирована цель работы, определены задачи работы, отражена новизна полученных результатов, теоретическая и практическая значимость, сформулированы защищаемые положения, выносимые на защиту.

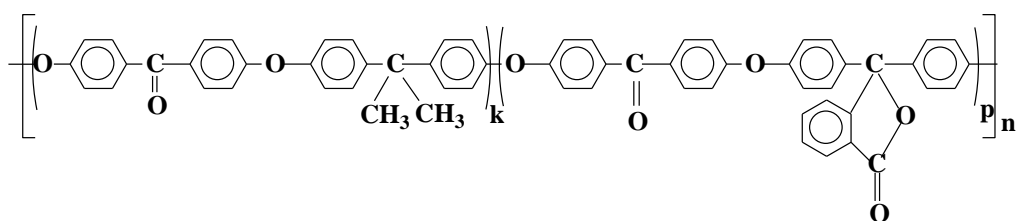
**В первой главе** приведен обзор современного состояния исследований несопряженных полимеров. Представлены данные о химической структуре, об основных физических и химических свойствах органических полимеров класса полиариленфталидов. Рассмотрены актуальные исследования полиариленов и их производных с применением квантово-химических методов.

**Во второй главе** описаны объекты исследования, методы изготовления экспериментальных образцов, методы компьютерного эксперимента, оптические и электрофизические методы исследования и анализ ошибок измерений.

**В разделе 2.1.** описаны объекты исследования, их физико-химические свойства и особенности синтеза. Проведен ЯМР-анализ концентрационного содержания функциональных групп флуорена. Описаны фрагменты со-ПАЭК (мономеры, димеры, тетрамеры), использованных в работе для проведения квантово-химических расчетов.

Объектами исследования были выбраны сополимеры полиариленэфиркетонов (статистические сополимеры с различной концентрацией функциональных групп), их структурные формулы представлены на рис. 1.

а)



б)

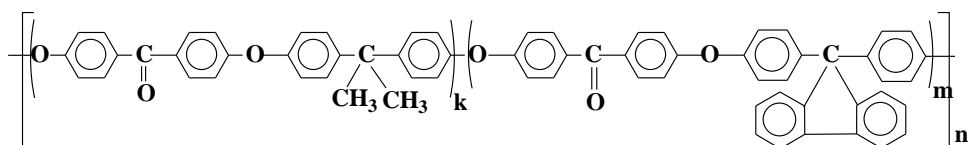


Рисунок 1. Структурные формулы: а) сополимеры фталидсодержащих полиариленэфиркетонов, б) сополимеры флуоренсодержащих полиариленэфиркетонов.

Данные полимеры были синтезированы в Институте органической химии Уфимского научного центра РАН и в лаборатории полиариленфталидов ИНЭОС РАН методом электрофильной поликонденсации [6-8].

**В разделе 2.2.** описаны квантово-химические методы исследования и аппаратное обеспечение.

Для проведения квантово-химических расчетов в данном научном исследовании использовался пакет программ Firefly 8.1 (тестовая версия, специально для графических процессоров) и метод теории функционала плотности B3LYP/6-31+G(d), который довольно широко применяется и позволяет получать удовлетворительные результаты для широкого класса органических молекул, для предварительной оптимизации химической структуры органических молекул был использован полуэмпирический метод Austin Model 1 (AM1). Данные расчеты проводились с помощью высокопроизводительных систем Tesla 2010 с объемом оперативной памяти 96 Гб.

**Раздел 2.3.** описаны методы изготовления экспериментальных образцов для исследования оптических и электрофизических свойств, содержит информацию об оптических и электрофизических методах исследования, а также представлен анализ ошибок для прямых и косвенных измерений

Для оптического исследования экспериментальные образцы изготавливали следующим образом: на очищенную кварцевую подложку методом центрифугирования наносили определенное количество раствора полимера, чтобы он полностью покрыл подложку. Схема исследуемого образца представлена на рис. 2.а. Очистка подложек осуществлялась в 3 этапа в ультразвуковой ванне. Первый этап – очистка в ацетоне чистом для анализа, второй этап – в этиловом спирте 95%, третий этап – в дистиллированной воде. Для формирования тонкой пленки капля раствора помещалась на поверхность подложки, укрепленную на держателе центрифуги. Затем подложка приводилась во вращение со скоростью 3000 об/мин. Образовавшаяся на подложке полимерная пленка высушивалась сначала при комнатной температуре в течение 60 минут, затем отжигалась в сушильном шкафу при температуре 120°C в течение суток для удаления остатков растворителя из объема пленки. Толщина полученных пленок варьировалась от 200 до 700 нм, которая контролировалась методами атомно-силовой микроскопии.



Рисунок 2. Схема исследуемого образца: а) для оптического исследования - 1) слой полимера, 2) кварцевое стекло; б) для электрофизического измерения - 1) металл (Cu), 2) слой полимера, 3) смесь окислов индия и олова, полученный в атмосфере аргона.

Экспериментальные образцы для электрофизических измерений были подготовлены с использованием методов центрифугирования и вакуумного термодиффузионного напыления. На рис.2.б. показана схема образца.



Изготовление полимерной пленки завершалось двух этапной сушкой. Сначала 60 минут при нормальных условиях, далее для удаления остатков растворителя в сушильном шкафу – 10 часов при температуре 120°C. Металлический электрод наносился методом термодиффузионного осаждения пленки металла в вакууме.

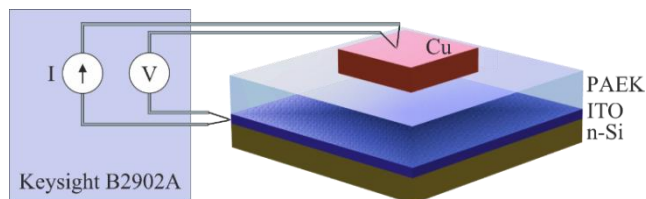


Рисунок 3. Схематическая структура образца и схема измерения.

Экспериментальные образцы для проведения электрофизических измерений представляли собой многослойные структуры типа металл/полимер/ITO (рис.3). В качестве металла использовалась медь, как типичный контактный металл, используемый в конструкции тосособирающего узла солнечного элемента. Прозрачная электропроводящая пленка из смеси окислов индия и олова (ITO) была выбрана из этих же соображений. ITO было нанесено на поверхность кремниевых пластин, которые играли роль подложек в экспериментальной конструкции измерительной ячейки.

В качестве основных экспериментальных методов использовались методы вольтамперных характеристик и спектроскопии оптического поглощения. Контроль качества полученных образцов осуществлялся с использованием методов атомно-силовой микроскопии.

Исследование оптических свойств пленок проводились методом оптического поглощения в УФ-видимой области 190–1000 нм, измерения проводились на спектрофотометре Shimadzu UV-1800.

Измерение ВАХ проводили с помощью источника-измерителя B2902A с использованием зондовой станции MPI ETS50 в температурном интервале 25-125 °С. Этот температурный интервал был выбран с учетом условий эксплуатации солнечных элементов.

Определение погрешностей измерений производилось общепринятым методом для прямых и косвенных измерений. В работе учитывались приборные и случайные погрешности.

**В третьей главе** проведено обсуждение полученных результатов и сделаны выводы.

**В разделе 3.1.** представлены результаты квантово-химического исследования фрагментов полимерных пленок из класса полиариленов. В качестве модельного соединения выбран полидифениленфталаид.

В связи с тем что в процессе синтеза могут образовываться молекулы с различным геометрическим расположением функциональных групп, были рассмотрены четыре возможных типа молекулярных структур: линейная или спиральная синдиотактическая и изотактическая конфигурации, которые

различаются направлением угла между фенильными группами, присоединенными к фталидной группе. Выявлено, что в процессе геометрической оптимизации осуществляется переход линейной изотактической конфигурации в синдиотактическую, а спиральная синдиотактическая конфигурация стремится развернуться в линейную синдиотактическую. Таким образом, в результате квантово-химических исследований установлено, что энергетически наиболее выгодными конфигурациями макромолекул являются линейная синдиотактическая и спиральная изотактическая.

**В разделе 3.2.** описаны результаты квантово-химического исследования соединений модельных для со-ПАЭК и описана модель не взаимодействующих функциональных групп.

Для интерпретации полученных результатов квантово-химических расчетов был предложен следующий подход. В связи с тем, что существует определенная проблема в виду ограничения вычислительных мощностей и что в некоторых сополимерах присутствует маленькое содержание функциональных групп, было предложено не рассматривать большие макромолекулы, потому что это несопряженный полимер и электронные состояния локализованы в пределах мономерных звеньев. В связи с этим возможное взаимное влияние мономеров ограничивается ближайшим окружением.

Предложено ввести учет взаимного влияния электронного строения мономерных звеньев и функциональных групп на основе модели Свораковского, активно используемого в моделях легирования неорганических полупроводников и допированных полимеров: в качестве хозяина был выбран гомополимер с изопропилиденовой группой (I), в качестве гостя – фталид- (P) или флуорен (F) содержащие функциональные группы.

Квантово-химический эксперимент был структурирован таким образом, что в начале моделировали мономерные соединения, затем димеры, тетрамеры и далее комбинации из базового соединения и функциональных групп. Полученные результаты расчетов были проанализированы с точки зрения корреляции их изменений при вариации содержания функциональных групп с результатами экспериментальных исследований физических свойств сополимеров.

**В пункте 3.2.1.** описаны результаты квантово-химических расчетов мономеров, димеров и тетрамеров со-ПАЭК. Представлены в виде таблиц направления дипольных моментов исследуемых соединений, визуализировано распределение электронной плотности верхней занятой (ВЗМО) и нижней вакантной молекулярной орбитали (НВМО) для всех модельных систем. Значения дипольных моментов, энергии сродства к электрону и потенциал ионизации мономеров, димеров и тетрамеров объединены в таблицы 3.4, 3.8, 3.12 соответственно. Из данных квантово-химических расчетов энергетических параметров следует, что состав и

структура молекул влияют на энергетические параметры молекул, такие как потенциал ионизации, сродство к электрону, ширина запрещенной зоны (разница энергий НВМО и ВЗМО).

Установлено, что при увеличении количества звеньев в гомополимере наблюдается уменьшение значения потенциала ионизации, энергии сродства к электрону и ширины запрещенной зоны, но увеличение дипольного момента молекулы.

В случае со-ПАЭК, расположение функциональных групп оказывает влияние на электронные параметры модельных соединений. В частности в тетрамерах с фталидными группами, разница ширины запрещенной зоны сополимеров с одинаковым количеством функциональных групп составляет до 0.15 эВ. При этом, в не зависимости от местоположения функциональной группы, НВМО сохраняется в каркасной части полимера. А ВЗМО может находиться как в боковых группах, так и в каркасной части полимера.

**В пункте 3.2.2.** описана модель Свораковского, согласно которой электронные состояния примеси для того, чтобы влиять на свойства материала должны находиться внутри запрещенной зоны. При этом те состояния, которые попадают в область разрешенных энергий не должны влиять на изменение электронных свойств конечного материала. На основании данной модели построена диаграмма распределения энергий для разных молекулярных структур, в которой сгруппированы различные комбинации базового мономера и функциональных групп. НВМО базового модельного соединения (полиизопропилиден) в твердотельной терминологии формирует дно зоны проводимости, а ВЗМО — формирует потолок валентной зоны.

В рамках модели Свораковского было принято предположение, что из-за отсутствия сопряжения активные центры, которые должны возникать вблизи функциональных групп, должны быть по размерам ограничены. Данное предположение легло в дальнейшем в подход сопоставления эксперимента с результатами квантово-химического моделирования на основе реализации системы невзаимодействующих компонентов (функциональных центров) полимерной цепи.

**В разделе 3.3.** представлены результаты исследования спектров поглощения и пропускания пленок со-ПАЭК. Толщины образцов были оценены конвертным методом и измерены методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). По оптическим спектрам, методами Тауца и подгонки спектра поглощения, рассчитаны ширина запрещенной зоны полимеров.

Метод Тауца основан на предположении, что зависящий от энергии коэффициент поглощения  $\alpha$  может быть выражен следующим уравнением:

$$(\alpha h\nu)^{1/\gamma} = B(h\nu - E_g) \quad (1)$$

где  $h$  — постоянная Планка,  $\nu$  — частота фотона,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $B$  — постоянная. Коэффициент  $\gamma$  зависит от характера электронного перехода и равен 1/2 или 2 для ширины запрещенной зоны прямого и непрямого перехода соответственно [9].

Для оценки ширины запрещенной зоны методом Тауца строится график  $(\alpha h\nu)^2$  как функции  $(h\nu)$  (рис.4.а). Значения оптической энергетической щели получаем путем экстраполяции линейного участка зависимости  $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$  до пересечения с осью энергии  $h\nu$ .

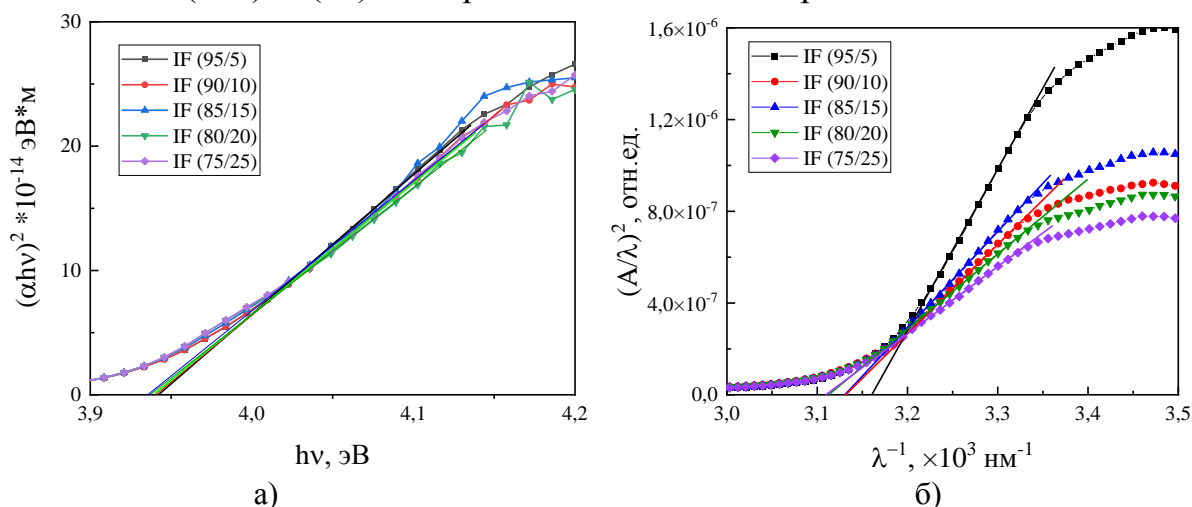


Рисунок 4. Спектры поглощения: а) в координатах Тауца, б) в координатах  $(A/\lambda)^2$  от  $(\lambda^{-1})$ .

Метод подгонки спектра поглощения (AFS) основан на результатах поглощения без учета толщины полимера [10]. Данный метод описывается следующими соотношениями:

$$Abs = D_1 \lambda \left[ \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{opt}} \right]^{n-1} + D_2 \quad (2)$$

$$D_1 = [t(hc)^{n-1} / 2.303] K \quad (3)$$

где  $n = 1/2$  для непрямого перехода,  $D_2$  постоянная.

Оптическая ширина запрещенной зоны может быть оценена путем экстраполяции прямого участка графика зависимости до  $Abs = 0$ , как показано на рис.4б.

Полученные результаты оценки ширины запрещенной зоны двумя методами представлены в Таблице 1

Таблица 1. Ширина запрещенной зоны со-ПАЭК, оцененная из оптических спектров.

Обозначение	%, фл.гр.	$E_g$ (Таус)	$E_g$ (AFS)
IF (95/5)*	5	3,944	3,919
IF (90/10)	10	3,942	3,889
IF (85/15)	15	3,931	3,879
IF (80/20)	20	3,932	3,859
IF (75/25)	25	3,938	3,855

\* В скобках указано процентное соотношение содержания соответствующих мономеров в полимере.

На рис. 5 представлена зависимость ширины запрещенной зоны от концентрации флуореновых групп полимера со-ПАЭК. Установлено, что с увеличением содержания флуореновых групп оптическая ширина

запрещенной зоны уменьшается. Аналогичный характер изменения ширины запрещенной зоны в зависимости от структуры со-ПАЭК зафиксирован и по результатам квантово-химических расчетов. По расчетным данным,  $E_g$  определялась как разница между энергиями нижней вакантной и верхней занятой молекулярной орбитали.

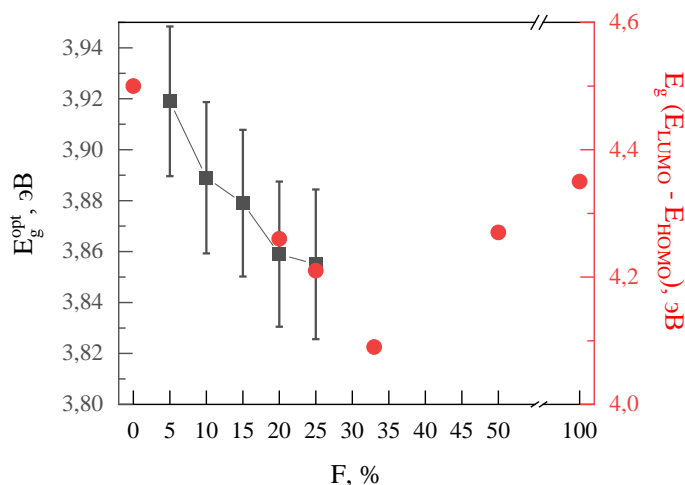


Рисунок 5. Зависимость ширины запрещенной зоны от концентрации флуореновых групп полимера со-ПАЭК, полученные методом подгонки спектра поглощения (левая ось ординат) и полученные из квантово-химических расчетов (правая ось ординат).

Полученные значения  $E_g$  для разных концентраций флуореновых групп полимера со-ПАЭК представлены только для определенных модельных соединений в связи с тем, что в расчете теоретическими методами нет возможности подобрать концентрацию флуореновых групп точно такую же как в эксперименте. Это связано с тем, что вычислительные ресурсы ограничены и не позволяют провести расчеты используемым квантово-химическим методом молекул со-ПАЭК с числом мономерных звеньев более 5.

Для определения степени беспорядка в полимерах и характера изменения плотности локализованных состояний в запрещенной зоне полимера, оценена энергия Урбаха ( $E_u$ ).

Значение  $E_u$  может быть получено из графика, построенного между  $\ln \alpha$  и  $h\nu$ . Наклон даст значение  $1/E_u$ , а точка пересечения даст  $\ln \alpha_0$  (как показано на рис.6). Рассчитанные  $E_u$  со-ПАЭК ~ 100мэВ, что соответствуют аморфным материалам. Однако, в зависимости от концентрации флуореновых групп изменяется нелинейно (Табл.2).

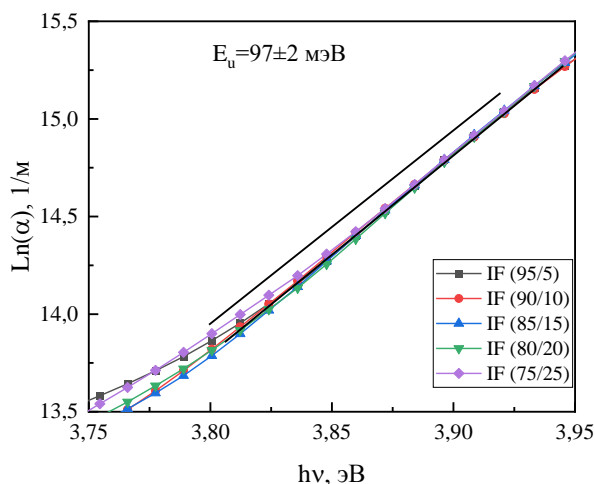


Рисунок 6. Зависимость  $\ln(\alpha)$  и  $h\nu$  для определения энергии Урбаха.

Таблица 2. Энергия Урбаха, оцененная методом подгонки спектра поглощения для тонкой пленки и из квантово-химических расчетов.

Обозначение	%, фл.гр.	$E_u$ , эВ (из эксперимента)	$E_u$ , эВ (из квантово- химических расчетов)
IF (95/5)	5	0,098	0,28
IF (90/10)	10	0,099	0,29
IF (85/15)	15	0,096	0,24
IF (80/20)	20	0,095	0,23
IF (75/25)	25	0,098	0,28

Для более наглядного представления зависимости энергии Урбаха от содержания функциональной группы были построены графики (рис.7).

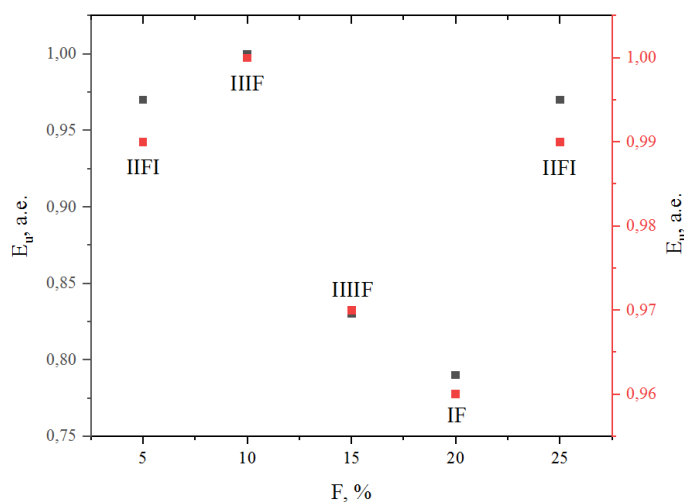


Рисунок 7. Зависимость энергии Урбаха от концентрации флуореновых групп полимера со-ПАЭК, полученные методом подгонки спектра поглощения для тонкой пленки (левая ось ординат) и из квантово-химических расчетов (правая ось ординат), нормированных по максимальной энергии.

Так как полимер статистический, то при его формировании могут образовываться различные функциональные центры. Сравнивая зависимость энергии Урбаха от концентрации флуореновых групп, наблюдаем корреляцию с экспериментом и, таким образом, можно определить молекулярную структуру функционального центра.

**В разделе 3.4.** описаны электрофизические свойства со-ПАЭК, проведен анализ вольт-амперных характеристик (ВАХ) образцов медь/ПАЭК/ITO(Ar), ITO полученный в атмосфере аргона, проведена оценка ширины «хвоста» зоны проводимости из ВАХ.

Анализ ВАХ (рис.8) в рамках модели токов, ограниченных объемным зарядом, позволил оценить параметры носителей заряда, использование модели Шоттки позволило оценить высоту потенциального барьера, как на границе раздела металл/полимер, так и на контакте ITO/полимер.

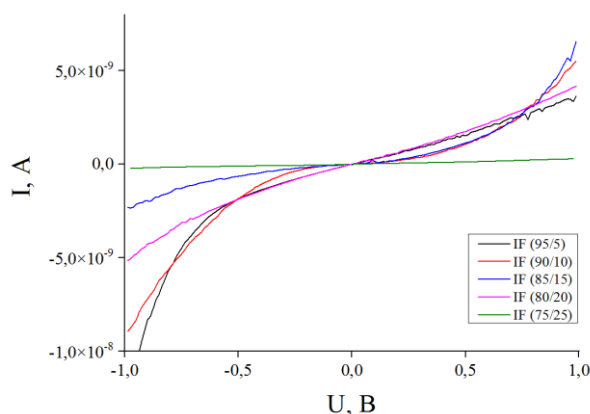


Рисунок 8. Объединенная вольт-амперная характеристика структуры Cu/ПАЭК/ITO(Ar) для различной концентрации функциональных флуореновых групп в ПАЭК.

Результаты проведенных оценок представлены в таблице 3. Полученные значения величин находятся в допустимом интервале значений для пленок полимеров этого класса.

Таблица 3. Величина энергетических барьеров на границах раздела ПАЭК/Cu и ПАЭК/ITO (Ar), концентрация и подвижность носителей зарядов.

ПАЭК /граница раздела	Cu/ПАЭК			ITO/ПАЭК		
	$\phi$ , эВ	$n$ , $m^{-3} \times 10^{20}$	$\mu$ , $cm^2/V \cdot s \times 10^{-8}$	$\phi$ , эВ	$n$ , $m^{-3} \times 10^{20}$	$\mu$ , $cm^2/V \cdot s \times 10^{-8}$
5%	0,68	2,93	4,20	0,68	3,79	3,80
10%	0,74	0,53	4,23	0,74	0,95	3,18
15%	0,73	1,53	4,23	0,74	1,98	1,76
20%	0,67	2,44	5,36	0,67	3,83	3,88
25%	0,72	5,04	0,21	0,72	7,65	0,10

Проведен сравнительный анализ результатов компьютерного эксперимента, оптических и электрофизических свойств тонких пленок со-ПАЭК.

Известно, что согласно инжекционной модели в области средних напряженностей электрического поля наблюдается степенная зависимость между током и напряжением:

$$I = K \cdot U^n, \quad (4)$$

где  $K$  — коэффициент, зависящий от толщины пленки, плотности распределения ловушек и проводимости исследуемых материалов.

В свою очередь коэффициент  $K$  пропорционален  $d^{-\alpha}$ , где  $d$  — толщина полимерной пленки,  $\alpha$  — константа.

При логарифмировании (4), получаем

$$\log(I) = \log(K) + n \cdot \log(U) \quad (5)$$

На рис. 9 представлены зависимости показателя  $n$  от напряжения для структур типа металл/полимер/ИТО в атмосфере аргона для положительной области отдельно.

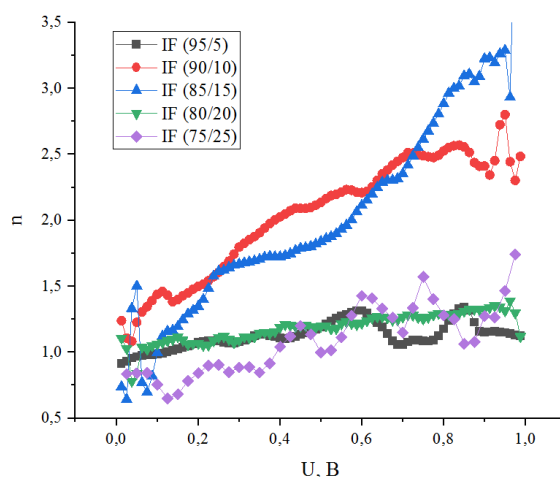


Рисунок 9. Зависимость показателя  $n$  от напряжения  $U$  в структуре Cu/ПАЭК/ИТО(Ar) для положительной области отдельно.

Данный показатель мы использовали для оценки ширины «хвоста» зоны проводимости, которую можно вычислить по следующей формуле (8):

$$J = q^{1-l} \mu N_c \left( \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 l}{N_i (l+1)} \right)^l \left( \frac{2l+1}{l+1} \right)^{l+1} \frac{V^{l+1}}{L^{2l+1}} \quad (6)$$

$$l = \frac{E_{ch}}{k_B T} \quad (7)$$

$E_{ch}$  — ширина «хвоста» зоны проводимости,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура  $n = l + 1$ ,  $l = n - 1$ ;

$$E_{ch} = l k_B T \quad (8)$$

На рис. 10. представлена зависимость высоты потенциального барьера в структуре Cu/ПАЭК/ИТО(Ar) от концентрации функциональных флуореновых групп в ПАЭК.



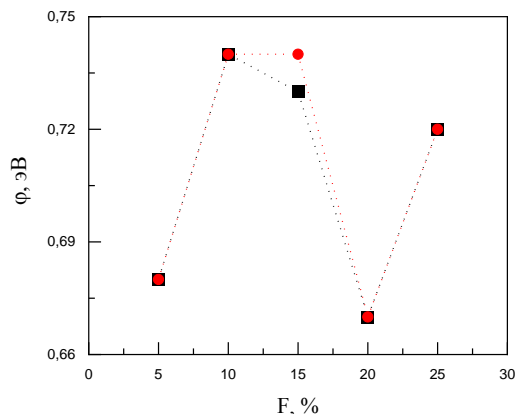


Рисунок 10. Зависимости высоты потенциального барьера в структуре Cu/ПАЭК/ITO(Ar) от концентрации функциональных флуореновых групп в ПАЭК. Разные границы раздела обозначены, как ■ – Cu/ПАЭК, ● – ITO(Ar)/ПАЭК.

На рис.11. представлены зависимость ширины «хвоста» зоны проводимости от содержания флуореновой группы ( $U=0.59$  В,  $E_{ch}=\pm 0.005$  eV) и зависимость энергии Урбаха от содержания флуореновой группы из результатов квантово-химических расчетов.

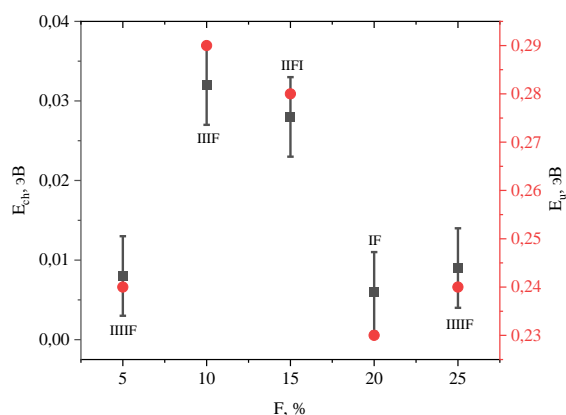


Рисунок 11. Зависимость ширины «хвоста» зоны проводимости от содержания флуореновой группы по данным ВАХ (левая ось ординат) ( $U=0.59$  В,  $E_{ch}=\pm 0.005$  eV) и из результатов квантово-химических расчетов (правая ось ординат).

Анализируя данные зависимости, мы наблюдаем корреляцию между результатами из эксперимента и квантово-химическими расчетами, согласно которым изменение электронных свойств при увеличении концентрации флуореновой группы происходит немонотонно.

Установлено, то в формировании ширины «хвоста» локализованных электронных состояний вблизи дна зоны проводимости могут участвовать различные функциональные центры. Таким образом, из предположения что НВМО базового модельного соединения (полиизопропилиден) формирует дно зоны проводимости, а функциональные центры с флуореновыми группами приводят к размытию этих зон, были рассчитаны энергии  $E_{ch}^{расч} \propto E_{LUMO}^I - E_{LUMO}^{\phi, гр.}$ . Сопоставляя данные эксперимента с результатами

квантово-химических расчетов, мы можем сделать предположение о вероятностном характере вклада определенной комбинации функциональных групп в процессе транспорта носителей заряда.

**В заключении** приведены основные выводы работы:

1. Оптическая ширина запрещенной зоны со-ПАЭК, содержащий изопронилиденную и флуореновую группы, зависит от концентрации функциональных боковых групп в макромолекуле и уменьшается с их увеличением в диапазоне от 5 до 25 %.

2. Параметры электронных транспортных процессов тонких пленок со-ПАЭК (подвижность и концентрация носителей заряда, высота потенциального барьера на контакте металл (полупроводник)/полимер) изменяются немонотонно в зависимости от химической структуры полимера. При этом в электронных транспортных процессах участвуют лишь некоторые функциональные центры макромолекул.

3. Разница между энергиями нижних вакантных молекулярных орбиталей базового полимера (полиизопронилиден) и соответствующих орбиталей функциональных центров со-ПАЭК формируют хвост локализованных электронных состояний зоны проводимости.

4. Электрофизические параметры, участвующие в транспорте носителей заряда, связаны с особенностями химического строения макромолекулы и вероятностью формирования конкретного функционального центра.

**Благодарности:** Автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю д.ф.-м.н., профессору Лачинову Алексею Николаевичу за консультации, постановку цели и задач, советы и ценные замечания в работе над диссертацией. Также благодарит сотрудников Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН д.х.н., профессора Салазкина С.Н. и к.х.н., с.н.с. Шапошникову В.В. за синтез полимеров. Кроме того, автор благодарит за помощь сотрудников кафедры физики и нанотехнологий БГПУ им. М.Акмиллы, сотрудников ИФМК УФИЦ РАН и НИИЯФ МГУ им. М.В. Ломоносова за проведение совместных исследований и участие в анализе результатов.

#### **Список цитируемой литературы**

1. Лачинов, А. Н. Электроника тонких слоев широкозонных полимеров // А. Н. Лачинов, Н. В. Воробьева / УФН. – 2006. – Т. 176. – №2. – С. 1249–1266.
2. Лачинов, А. Н. Особенности транспорта носителей заряда в структуре полупроводник-полимер-металл / А. Н. Лачинов, Д. Д. Карамов, А. Ф. Галиев, С. Н. Салазкин, В. В. Шапошникова, Т. Н. Кост, А. Б. Чеботарева // Письма в ЖТФ. – 2023. – Т. 49. – В. 1. – С. 20-22.

3. Мошелев, А. В. Исследование особенностей переноса заряда в полиариленфталидах методом термостимулированного тока / А.В Мошелев // Дис. канд. физ.-мат. наук. г. Уфа. - 2009. - С. 158.
4. Ильясов, В. Х. Влияние химической структуры полиариленфталидов на токи термостимулированной деполяризации / В.Х. Ильясов// Дис. канд. физ.-мат. наук: БашГУ, Уфа. - 2011. – С. 155.
5. Накаряков, А. С. Термостимулированная люминесценция полиариленфталидов / А. С. Накаряков // Дис. канд. физ.-мат. наук: БашГУ, Уфа. - 2013. – С. 182.
6. Золотухин, М. Г. Некоторые закономерности синтеза полиариленфталидов гомополиконденсацией *n*-(3-хлоро-3-фталидил)-бефинила / М. Г. Золотухин, В. А. Ковардаков, С. Н. Салазкин, С. Р. Рафиков // Высокомолек. Соед. – 1984. – Т. 26а. – № 6. – С. 1212-1217.
7. Zolotukhin, M. G. Gelation in the homopolycondensation of 3-aryl-3-chlorophthalides. / M. G. Zolotukhin, V. D. Skirda, E. A. Sedova, V. I. Sundukov, S. N. Salazkin // Macromol. Chem. – 1993. – V. 94. – №. 2. – P. 543-549.
8. Рафиков, С.Р. Полигетероарилены для изготовления термостойких материалов и способ их получения. / С. Р. Рафиков, Г. А. Толстиков, С. Н. Салазкин, М. Г. Золотухин // А.С. 734989 СССР. – Б.И. – 19891. – №20.
9. Calvin, S. XAFS for Everyone. – CRC press. - 2013.
10. Kaky, K. M. Structural, thermal, and optical analysis of zinc borosilicate glasses containing different alkali and alkaline modifier ions / K. M. Kaky et al. //Journal of Non-Crystalline Solids. – 2017. – V. 456. – P. 55-63.

## **СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

### **Статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Российской Федерации:**

1. Жданов, Э.Р. Квантово-химические исследования электронной структуры комплексов с переносом заряда в нанополимерных пленках./ Э.Р. Жданов, **Г.Ш. Султанбаева**, А.Н. Лачинов // Известия высших учебных заведений. Физика. - 2010. - № 3/2. - С. 98-101.
2. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры полидифениленфталита / **Г.Ш. Байбулова**, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Вестник Омского университета. - 2014. - № 2. - С. 46–49.

### **Статьи в отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RCSI, Scopus, Web of Science):**

3. Калимуллина, Л.Р. Теоретическая оценка энергии сродства к электрону методами теории функционала плотности для производных хинона / Л.Р. Калимуллина, Е.П. Нафикова, Н.Л. Асфандиаров, Ю.В. Чижов,

**Г.Ш. Байбулова**, Э.Р. Жданов, Р.М. Гадиев // Журнал физической химии. – 2015. – Т. 89. – № 3. – С. 426-432.

4. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое исследование надмолекулярной структуры пленок полимеров класса полиарилеифталидов. / **Г.Ш. Байбулова**, А.Н. Лачинов, Р.М. Гадиев, Л.Р. Калимуллина, А.Ф. Галиев, А.Р. Юсупов // Известия Российской академии наук. Серия физическая. - 2020. - Т. 84. - № 5. - С. 688–690.

#### **Статьи в рецензируемых научных журналах, входящих в РИНЦ:**

5. Байбулова Г.Ш. Исследование физико-химических особенностей строения и электронных свойств сополиарилеифиркетонов / **Г.Ш. Байбулова**, Д.Д. Карамов, А.Ф. Галиев, А.Б. Чеботарева, В.В. Шапошникова, С.Н. Салазкин, А.Н. Лачинов // Известия Уфимского научного центра Российской академии наук. - 2024. - № 1. - С. 49–54.

6. Султанбаева, Г.Ш. Электронная структура мономеров, димеров и димерных комплексов полиарилеифталидов / Г.Ш. Султанбаева, Л.Р. Калимуллина, Э.Р. Жданов, З.С. Самигуллина // Нанотехнологии: наука и производство. -2010. - №1(6). - С. 85-90.

7. Галиев, А.Ф. Надмолекулярная структура полидифенилеифталидов: квантово-химические расчеты и эксперимент/ А.Ф. Галиев, Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов, Л.Р. Калимуллина, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, А.С. Накаряков // Нанотехнологии: наука и производство. - 2012. - №4(19). - С.55.

8. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое моделирование и атомно-силовая микроскопия надмолекулярной структуры тонких пленок полидифенилеифталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Нанотехнологии: наука и производство. -2013. - №4 (25). - С. 9-13.

9. Галиев, А.Ф. Морфологические особенности металл/полимерных структур на основе пленок полидифенилеифталидов / А.Ф. Галиев, Р.М. Гадиев, А.А. Бунаков, Г.Ш. Байбулова, А.И. Сатыев // Нанотехнологии: наука и производство. - 2013. - №4 (25). - С.27-30.

10. Калимуллина, Л.Р. Особенности взаимодействия арилеифталидов с избыточным зарядом / Л.Р. Калимуллина, Р.Г. Рахмеев, А.Н. Лачинов, Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов // Нанотехнологии: наука и производство. -2013. - №4 (25). - С.31-37.

#### **Материалы российских и международных научных конференций:**

1. Султанбаева, Г.Ш. Структурные переходы в наноструктурированных пленках полиарилеифталидов / Г.Ш. Султанбаева, Э.Р. Жданов, Л.Р. Калимуллина, А.Н. Лачинов, А.Ф. Галиев // Сборник материалов IV Всероссийской конференции по наноматериалам НАНО-2011. - 1 - 4 марта 2011 г. - Москва. - ИМЕТ РАН. - С. 296.

2. Султанбаева, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры полиарилефталидов / Г.Ш. Султанбаева, Л.Р. Калимуллина, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, А.Ф. Галиев // Сборник тезисов Всероссийской конференции «Фотоника органических и гибридных наноструктур». – Черноголовка – 2011. – С. 150.

3. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры некоторых ариленифталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, Л.Р. Калимуллина // Сборник тезисов Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании». – Уфа. – 2-6 октября 2011.

4. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры некоторых ариленифталидов / Г.Ш. Байбулова, Л.Р. Калимуллина // // Сборник тезисов Всероссийской научно-практической конференции «Прикладная информатика и компьютерное моделирование». – 25-28 мая 2012. – Уфа. – Т. 1. – С. 60-61.

5. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое моделирование и атомно-силовая микроскопия надмолекулярной структуры полидифениленфталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Структура и динамика молекулярных систем: Сборник тезисов XIX Всероссийской конференции. - Яльчик. – 2012. - С.15.

6. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое моделирование и атомно-силовая микроскопия надмолекулярной структуры полидифениленфталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Структура и динамика молекулярных систем: Сборник статей XIX Всероссийской конференции. - Яльчик. – 2012. - Т.1. - С.36-40.

7. Байбулова, Г.Ш. Надмолекулярная структура наноструктурированных пленок полидифениленфталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, Л.Р. Калимуллина // Сборник тезисов Всероссийской молодежной конференции «Актуальные проблемы нано - и микроэлектроники». – 25-28 сентября 2012 г. – Уфа. – Башкирский Государственный Университет. – С. 102.

8. Байбулова, Г.Ш. Надмолекулярная структура тонких субмикронных пленок полидифениленфталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, Л.Р. Калимуллина // Сборник тезисов Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании». – 14-18 октября 2012. – Уфа. – Башкирский Государственный Университет. – С. 150.

9. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры полидифениленфталидов / Г.Ш. Байбулова, Д.О. Фирстов, Э.Р. Жданов, Л.Р. Калимуллина // Материалы всероссийской

научной конференции «Инновационный потенциал молодежной науки». - 19 октября 2012. - Уфа. - Т.4. - С.11

10. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое моделирование полидифениленфталида и атомно-силовая микроскопия надмолекулярной структуры его пленок / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Сборник тезисов Всероссийской молодежной конференции «Физика и химия наноразмерных систем» с элементами научной школы. – 13-17 ноября. – Екатеринбург. – 2012. – С. 147.

11. Байбулова, Г.Ш. Исследования надмолекулярной структуры тонких пленок полидифениленфталида / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, А.Н. Лачинов, В.М. Корнилов, Л.Р. Калимуллина // Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Математическое моделирование на основе методов Монте-Карло». – 28–29 июня 2013 г. – Бирск. – С. 3-9.

12. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры тонких субмикронных пленок полидифениленфталида / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, Л.Р. Калимуллина // Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании. Тезисы докладов VI Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых. – Уфа. – 2013 г. – С. 169.

13. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования надмолекулярной структуры тонких пленок полидифениленфталида / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Сборник статей VI Всероссийской молодежной школы-конференции. Квантово-химические расчеты: структура и реакционная способность органических и неорганических молекул. – Иваново. – 2013 г. – С.135-140.

14. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования и атомно-силовая микроскопия надмолекулярной структуры тонких субмикронных пленок полидифениленфталида / Г.Ш. Байбулова, А.Ф. Галиев, Э.Р. Жданов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина, В.М. Корнилов // Сборник тезисов II Всероссийской научной молодежной конференции «Актуальные проблемы нано - и микроэлектроники». - 1-5 декабря 2014 г. – Уфа. – Башкирский Государственный Университет. – С. 90.

15. Байбулова, Г.Ш. Компьютерное моделирование и анализ различных типов конфигураций надмолекулярной структуры тонких пленок полидифениленфталида / Г.Ш. Байбулова, Э.Р. Жданов, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина // Сборник тезисов III Всероссийской научной молодежной конференции «Актуальные проблемы нано - и микроэлектроники». – 01-04 декабря 2015 г. – Уфа. – Башкирский Государственный Университет. – С. 45.

16. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химическое исследование надмолекулярной структуры пленок полимеров класса полиариленфталидов / Г.Ш. Байбулова, А.Н. Лачинов, Р.М. Гадиев, А.Ф. Галиев // Сборник тезисов

докладов и сообщений Всероссийской конференции-школы с международным участием «Электронные спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах». - 22-25 мая 2019г. - Уфа. - БГПУ. - С. 102.

17. Байбулова, Г.Ш. Исследование надмолекулярной структуры пленок полимеров класса полиариленфталидов методами квантовой химии / Г.Ш. Байбулова, А.Н. Лачинов, Л.Р. Калимуллина, А.Ф. Галиев, Т.М. Байбулов // Сборник материалов V Всероссийской научно-методической конференции «Проблемы современного физического образования». - 24–26 октября 2019 г. - Уфа. – Башкирский Государственный Университет. – С.89-90.

18. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические расчеты для исследования многослойных наноразмерных органических систем / Г.Ш. Байбулова, Л.Р. Калимуллина, А.Н. Лачинов // Материалы Двадцать шестой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-26, Уфа, Башкортостан). - В1. - Т.1. – Екатеринбург – Ростов-на-Дону – Уфа. - ООО "Альтаир". - 2020. - С.223-224.

19. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования сополимеров и их взаимосвязь с экспериментальными результатами / Г.Ш. Байбулова, Л.Р. Калимуллина, А.Н. Лачинов // Сборник тезисов I Всероссийской молодежной школы-конференции «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании (ФМЦН-22)», посвященной 100-летию со дня рождения А.Д.Сахарова. - 25-27 апреля 2022 г. - Уфа. - С. 31-32.

20. Байбулова, Г.Ш. Квантово-химические исследования сополимеров и их взаимосвязь с экспериментальными результатами / Г.Ш. Байбулова, Л.Р. Калимуллина, А.Н. Лачинов // Тезисы докладов 81-й международной научно-технической конференции «Актуальные проблемы современной науки, техники и образования». - 17–21 апреля 2023 г. - Магнитогорск. - Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова. - Т.2. - С. 355.

21. Байбулова, Г.Ш. Оптические исследования сополимеров и их взаимосвязь с результатами расчетов методами квантовой химии / Г.Ш. Байбулова, Л.Р. Калимуллина, А.Н. Лачинов // Сборник тезисов II Всероссийской молодежной школы-конференции, посвященной 80-летию со дня рождения д.ф.-м.н., профессора Р.С.Сингатуллина «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании (ФМЦН-23)». - 18–20 апреля 2023 г. - Уфа. - Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы. - С.67-68.