

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РНЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

II ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

МНОГОМАСШТАБНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ И СТРУКТУР
В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ

Сборник тезисов докладов

Москва 2009

УДК 620.3(06)
ББК 32.847.8я5
В 85

II ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях». Сборник тезисов докладов.
М.: МИФИ, 2009. 492 с.

Настоящая книга является сборником трудов конференции ММПСН-2009, содержащим около трехсот тезисов докладов, предложенных специалистами из разных институтов и организаций России.

Работы отражают достижения и уровень исследований, тенденции и проблемы в области моделирования физических процессов, структур и материалов нанотехнологий.

Книга предназначена читателям, интересующимся тематикой представленных научных направлений.

Ответственный секретарь А.А. Тищенко

Статьи сборника издаются в авторской редакции

Материалы получены 20.12.2008

ISBN 978-5-7262-1152-7

© *Московский инженерно-физический институт
(государственный университет), 2009*

Подписано в печать 22.05.2009. Формат 60×84 1/16.
Печ. л. 30,75. Тираж 350 экз. Заказ № 235

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет)
Типография МИФИ
115409, Москва, Каширское ш., 31*

**Н.Г. СПИЦЫНА, А.Л. КАПИТАНЧУК¹, С.Л. НИКИТЕНКО,
А.С. ЛОБАЧ, М.Г. КАПЛУНОВ**

Институт Проблем Химической Физики РАН, 142432 г. Черноголовка, Московской обл., пр-т. акад. Семенова 1, Россия. E-mail: spitsina@icp.ac.ru

¹ Институт Теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова НАН Украины, 03680 Киев, ул. Метрологическая 14-Б, Украина. E-mail: alkapt@ukr.net

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОЛИСОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ И НАНОУГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Синтез новых органических полупроводников и создание на их основе дешевых полимерных солнечных элементов, состоящих из тонких фотоактивных слоев органических материалов, включающих нанокремний (фуллерен C₆₀, углеродные нанотрубки и их производные) является в настоящее время актуальной академической и прикладной задачей [1-6]. Преимущество гибких органических солнечных элементов связаны с технологичностью процесса их получения и утилизации, а также с возможностью использования объемно-гетероконтактных материалов [1-3]. Наиболее часто используемым акцепторам в солнечных батареях объемно-гетеропереходного типа является метанофуллерен 1-(3-метоксикарбонил)пропил-1-фенил[6,6]-C₆₁ (PCBM), который обеспечивает эффективную работу элементов в комбинации с рядом полисопряженных полимеров (PPV –поли фениленвинилены, PT - политиофены).

Для создания эффективных солнечных ячеек необходимо соблюдение цепочки процессов: поглощение света, диссоциация фотовозбужденного экситона, транспорт зарядов к токосъемным электродам ячеек. При этом необходима такая конфигурация энергетических уровней донора (полимер) и акцептора (нанокремний компонент), при которой разница энергии электрона на LUMO акцептора и HOMO донора максимальна [7]. В нашей работе мы рассматриваем модель подбора донорно-акцепторных компонент объемно-гетеропереходных фотовольтаических систем на основе квантово-химических расчетов и сравнительного анализа энергий МО как отдельных компонент донора и акцептора, так и их композиции с полимерами, при этом тушение фотолюминесценции полимера брали за индикатор эффективности взаимодействия полимера с фуллереном.

Для молекул C₆₀, PCBM, AFNP, C₆₀•4BA методом DFT/B3LYP/6-31G* были выполнены расчеты оптимальной геометрической конфигурации, энергий и профиля распределения электронной плотности основных МО. Результаты проведенных расчетов представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Энергии (эВ) молекулярных орбиталей, рассчитанные для отдельных молекул. Экспериментальные данные для энергетической щели получены из электрохимических экспериментов.

МО	C ₆₀	PCBM	AFNP	C ₆₀ -4BA
LUMO	-3.261	-3.652	-3.367	-2.603
HOMO	-6.051	-6.272	-6.067	-5.198
НОМО – LUMO щель				
Calculated	2.79	2.62	2.7	2.595

Проведены исследование тушения люминесценции полимера на полимерных композитах (ПК) на основе полимера поли(2-метокси-5-(2'-этилгексилокси)-1,4-фениленвинилена (МЕН-PPV), поли(3-гексилтиофена) (РЗНТ) с добавками 2-(азагомофуллерена)-5-нитропиримидина (AFNP), PCBM, тетра(бензиламинофуллерена) (C₆₀•4BA) и фуллерена C₆₀. Для нанокремниевых компонент проведены электрохимические эксперименты. Рассчитанные значения энергетической щели хорошо согласуются с результатами электрохимических экспериментов и исследованиями тушения люминесценции полимера, что расширяет пути подбора донорно-акцепторных компонент для фотовольтаических органических систем на основе нанокремниевых компонент.

Список литературы

1. H. Hoppe, N. S. Sariciftci, J. Mater. Res., 19 (2004) 1924-1945.
2. K. M. Coakley, M. D. Mc Gehee, Chem. Mater., 16 (2004) 4533-4542.
3. H. Hoppe, N. S. Sariciftci, J. Mater. Chem., 16 (2006) 45-61.
4. R. A. J. Janssen, J. C. Hummelen, N. S. Sariciftci, MRS Bulletin, 30 (2005) 33.
5. I.V.Tolstov, A.V.Belov, M.G.Kaplunov, I.K.Yakuschenko, N.G.Spitsina, M.M.Triebel, E.L.Frankevich. Journal of Luminescence, 112 (2005) 368-371.
6. N. Spitsina, I. Romanova, A. Lobach, I.Yakuschenko, M. Kaplunov, I. Tolstov, M. Triebel, E. Frankevich, J. Of Low Tem.Phys., 142 (2006) 201-206.
7. C.J. Brabec, A.Cravino, D. Meissner, N.S. Sariciftci, T. Fromberz, M.T. Rispens, L. Sanchez, J.C. Hummelen, Adv. Funct. Mater., 11(2001) 374.

Е.Г. ГАЛЬПЕРН, И.В. СТАНКЕВИЧ.

Институт элементорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН, г. Москва

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ НАНО-КОМПЛЕКСОВ Pd_n(C₆₀)_m

Проведены теоретические исследования структуры и электронного строения комплексов палладия с фуллеренами C₆₀.