

Υπολογιστική μελέτη της προσρόφησης του νερού στην επιφάνεια του αργύρου. Μεταβολή του έργου εξόδου και επίδραση στην απόδοση των OPVs και των OLEDs.

Το θέμα που πραγματεύεται η παρούσα διπλωματική είναι η μελέτη με μεθόδους πρώτων αρχών της προσρόφησης μορίων νερού στην (111) επιφάνεια του αργύρου με σκοπό να εντοπιστεί η επίδραση που θα έχει τυχόν μεταβολή του έργου εξόδου του μετάλλου στην λειτουργία των οργανικών φωτοβολταϊκών (OPVs) και των οργανικών διόδων φωτοεκπομπής (OLEDs). Οι υπολογισμοί γίνονται με τη χρήση της θεωρίας συναρτησιοειδούς της πυκνότητας (Density Functional Theory-DFT) και οι δυνάμεις van der Waals, που αναμένεται να παίζουν σημαντικό ρόλο στο υπό μελέτη σύστημα, λαμβάνονται υπόψη με τη μέθοδο DFT-D3 του Grimme. Ως πρώτο βήμα μελετάται η (111) επιφάνεια του αργύρου και υπολογίζονται η επιφανειακή ενέργεια και το έργο εξόδου. Έπειτα μελετάται η προσρόφηση του νερού στην επιφάνεια. Εξετάζονται διάφορα ποσοστά επικάλυψής της από μόρια νερού και προσδιορίζονται οι δομικές και ενεργειακές ιδιότητες των συστημάτων. Ως επόμενο βήμα προσδιορίζεται η μεταβολή του ηλεκτροστατικού δυναμικού της επιφάνειας για όλα τα ποσοστά επικάλυψης. Προκειμένου να διασαφηνιστεί η προέλευση της παρατηρούμενης αυτής μεταβολής, εξετάζεται η συμβολή του εγγενούς διπόλου του νερού και του διεπιφανειακού διπόλου που δημιουργείται στην διεπιφάνεια μετάλλου/νερού κατά την προσρόφηση. Τέλος προσδιορίζεται η μεταβολή στο έργο εξόδου της Ag(111) και εξετάζεται η επίδραση που επιφέρει στην λειτουργία των OPVs και των OLEDs.