

Υπολογιστική Μελέτη της Προσρόφησης Πρότυπων Οργανικών Ημιαγωγών σε Μεταλλικές Επιφάνειες για Εφαρμογές των Οργανικών Ηλεκτρονικών.

Σκοπός της διπλωματικής εργασίας είναι να αποκαλυφθούν οι μηχανισμοί σε ατομικό επίπεδο της επίδρασης του νερού στις ιδιότητες των μεταλλικών επιφανειών, αλλά και των μηχανισμών που διέπουν τη διεπιφάνεια μεταξύ μεταλλικών επιφανειών και οργανικών ημιαγωγών σε ένα οργανικό φωτοβολταϊκό (OPV) με τη χρήση της Θεωρίας Συναρτησιοειδούς της Πυκνότητας (Density functional theory- DFT). Ως πρώτο βήμα, εξετάστηκε η προσρόφηση του νερού πάνω στις επιφάνειες του αργύρου και του αλουμινίου και τα συστήματα μελετήθηκαν ως προς τη σταθερότητα τους. Επίσης μελετήθηκε η συσχέτιση της προσρόφησης των μορίων νερού με τη μεταβολή του έργου εξόδου των συστημάτων. Ως δεύτερο βήμα, εξετάστηκε η προσρόφηση των πρότυπων οργανικών ημιαγωγών PC₆₀BM και P3HT πάνω στην μεταλλική επιφάνεια του αργύρου. Μελετήθηκε διεξοδικά η σταθερότητα των δομών που εξετάστηκαν, καθώς και το πώς μεταβάλλεται το έργο εξόδου των επιφανειών λόγω της προσρόφησης. Τέλος, μελετήθηκε η επίδραση του ηλεκτροστατικού διπόλου που δημιουργείται στη διεπιφάνεια λόγω προσρόφησης στην απόδοση των OPVs.