

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТЕТРАЗАМЕЩЁННЫХ ПОРФИРИНОВ: ФОТОЭМИССИОННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

А.М.Ионов¹⁾, С.И.Божко¹⁾, В.С.Божко¹⁾, Л.В.Яшина²⁾, А.А.Волыхов²⁾,
М.М.Бржезинская³⁾, G.Dyker⁴⁾

¹⁾ *Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка*
²⁾ *Химический факультет Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, Москва*
³⁾ *Институт физики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург*
⁴⁾ *Ruhr-Universität, Bochum*

Органические молекулярные плёнки порфиринов привлекают внимание в последние годы в связи с их использованием в качестве темплатов для синтеза наноматериалов и в нанозлектронных приборах. Одно из наиболее интересных их свойств – способность изменять электронные характеристики и спиновые состояния под действием оптического возбуждения и введения носителей заряда, что важно для нанозлектроники. Для понимания их свойств и направленного их модифицирования требуется знание электронной структуры и химической связи в этих соединениях.

В данной работе электронная структура и химическая связь в тетраakis(3- и 4-пиридил)порфиринах изучалась экспериментально методами УФЭС, РФЭС и NEXAFS с использованием синхротронного излучения (BESSY II). Объектами изучения были плёнки порфиринов, осаждённые химически (из растворов в хлороформе) и *in situ* из молекулярного потока.

Проведены квантово-химические расчёты из первых принципов в рамках теории функционала плотности при помощи программы Gaussian 03 для порфина, тетраakis(4-пиридил)- и тетрафенилпорфирина. Получены теоретические спектры плотности состояний, промоделированы химические сдвиги остовных уровней C 1s, N 1s. Результаты расчёта и экспериментальные спектры согласуются между собой: характер особенностей в спектре высших заполненных орбиталей отражает расчётную плотность состояний с учётом экспериментального разрешения. Расчётные спектры уровней C 1s, N 1s многокомпонентны, причём химические сдвиги между компонентами воспроизводят расчётные значения.

ведущий научный сотрудник Ионов Андрей Михайлович
142432, Московская область, Черноголовка, Институтская ул., 2, ИФТТ РАН
Тел.: (495) 962-80-54; Факс: (496) 524-97-01; E-mail: ionov@issp.ac.ru