**Броцман, Виктор Андреевич.**
Фторсодержащие и двусферные производные фуллеренов : синтез, строение, физико-химические свойства и фотовольтаические приложения : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04 / Броцман Виктор Андреевич; [Место защиты: Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова]. - Москва, 2018. - 173 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат наук Броцман, Виктор Андреевич

Оглавление

Введение

2. Обзор литературы

2.1. Общие сведения о строении фуллеренов Сбо и С70

2.2. Метанофуллерены и гомофуллерены

2.3. Методы получения гидридов фуллеренов

2.4. Синтетические стратегии с использованием анионов фуллеренов

2.5. Синтез и строение трифторметилпроизводных фуллеренов

2.6. Двусферные производные фуллеренов

2.7. Применение производных фуллеренов в органической фотовольтаике

2.8. Заключение

3. Экспериментальная часть

3.1. Использованные реагенты и экспериментальное оборудование

3.2. Синтез дифторметиленовых производных С60 и С70

3.3. Синтез и выделение С8-С70(СЕэ)8 и С1-С70(СЕэ)10

3.4. Приготовление 2п/Си-пары

3.5. Общая методика гидрирования дифторметиленовых и трифторметильных производных фуллерена С60 и С70

3.6. Синтез диалкилированных производных дифторметилен-гомофуллерена С60(СБ2)

3.7. Синтез моноалкилированных производных гомофуллерена С60(СБ2)

3.8. Синтез гетеродиалкилированных производных дифторгомофуллерена С60(СБ2)

3.9. Общая методика синтеза эфиров глицина пара-толуолсуфонатов

3.10. Общая методика синтеза двусферных производных фуллеренов С60 и С70

3.11. Общая методика приготовления опытных фотовольтаических устройств с объемным гетеропереходом

3.12. Экспериментальный стенд для исследования фотоэлектрических характеристик

3.13. Методика измерения вольтамперных характеристик

3.14. Методика регистрации спектров фототока

4. Обсуждение результатов

4.1. Разработка синтетического подхода направленной функционализации дифторметиленовых производных фуллеренов С60 и С70

4.1.1. Теоретические аспекты

4.1.2. Синтез и разделение смесей дифторметиленовых производных фуллеренов С60 и С70

4.1.3. Синтез и строение C6o(CF2)H2

4.1.4. Синтез и строение двух изомеров C7o(CF2)H2

4.1.4. Синтез диалкилированных производных гомофуллерена C6o(CF2)

4.1.5. Строение диалкилированных производных гомофуллерена Сбо(СТ2)

4.1.6. Синтез монозамещенных производных гомофуллерена Сбо(СТ2)

4.1.8. Строение моноалкилированных производных дифторгомофуллерена С6о(СТ2)

4.1.7. Синтез гетеродиалкилированных производных дифторгомофуллерена С6о(СТ2)

4.2. Синтез и строение гидридов Cs-C7o(CF3)8 и С1-С7о(СТз)1о

4.3. Двусферные производные фуллеренов С6о и С7о

4.3.1. Синтез и характеризация новых двусферных производных фуллерена С6о

4.3.2. Синтез и характеризация двусферных производных фуллерена С7о и смешанных С6о/С7о двусферных производного

4.4. Исследование физико-химических свойств соединений, перспективных для фотовольтаических приложений

4.4.1. Оценка растворимости синтезированных соединений

4.4.2. Исследование термической стабильности диалкилированных производных гомофуллерена С6о(СТ2) и двусферных производных фуллеренов С6о и С7о

4.4.3. Особенности электронного строения диалкилированных производных гомофуллерена С6о(СТ2) и двусферных производных фуллеренов С6о и С7о

4.4.3.1. Диалкилированные производные гомофуллерена С6о(СТ2)

4.4.3.2. Двусферные производные фуллерена С6о

4.4.3.3. Смешанные С6о^7о двусферные производные и двусферные производные фуллерена С7о

4.5. Исследование синтезированных соединений в качестве компонентов с n-типом проводимости в органических солнечных батареях с объемным гетеропереходом

4.5.1. Фотовольтаические устройства

4.5.2. Солнечные батареи на основе P3HT и диалкилированных производных гомофуллерена С6о(СТ2)

4.5.3. Солнечные батареи на основе P3HT и высокорастворимых двусферных производных фуллерена С6о

4.5.4. Влияние алкильного заместителя в двусферных производных фуллеренов на фотовольтаические характеристики и морфологию солнечных батарей на их основе

5. Заключение

6. Основные результаты и выводы

7. Список литературы

Список обозначений и сокращений

НВМО - низшая вакантная молекулярная орбиталь

ВЗМО - высшая занятая молекулярная орбиталь

МО - молекулярная орбиталь

СФЭ - солнечный фотоэлемент

P3HT - поли(3-гексилтиофен-2,5-диил)

rr-P3HT - региорегулярный поли(3-гексилтиофен-2,5-диил)

ITO - indium tin oxide - твердый раствор оксидов индия (III) и олова (IV) (90% вес. In2O3 и 10% вес. SnO2)

PEDOT:PSS - поли(3,4-этилендиокситиофен)/поли(стиролсульфонат) ВКЭ - внешняя квантовая эффективность ВАХ - вольтамперная характеристика

ДЦТБ - транс-2-[3-(4-трет-бутилфенил)-2-метил-2-пропенилиден]малонодинитрил HMBC - Heteronuclear Multiple-Bond Coherence - гетероядерная когерентность через несколько связей

HSQC - Heteronuclear Single-Bond Quantum Correlation - гетероядерная квантовая корреляция через одну связь

ВЭЖХ - высокоэффективная жидкостная хроматография

МАЛДИ - матрично-активированная лазерная десорбция/ионизация

ТФП - теория функционала плотности

КССВ - константа спин-спинового взаимодействия

РСА - рентгеноструктурный анализ

АСМ - атомно-силовая микроскопия

ИЭР - ионизация электрораспылением

[60]PCBM - метиловый эфир фенил-Сб1-бутановой кислоты

Me - метил, С№

Bn - бензил, CH2C6H5

Allyl - аллил, OT2CHCH2

PFB - пентафторбензил, CH2C6F5

CEM - карбоксиэтилметил, CH2CO2C2H5

Ts - тозил, rapa-CH3C6H4SO2

о-ДХБ - орто-дихлорбензол

ТДАЕ - тетракис(диметиламино)этилен

ДМФА - диметилформамид

ТГФ - тетрагидрофуран