

**СТАТИСТИКА ДВИЖЕНИЯ КЛАССИЧЕСКИХ ИОНОВ Cs⁺ И Cl⁻
В ЗАМКНУТОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПОЛОСТИ В ПОЛИМЕРЕ
С АКЦЕПТОРАМИ И ДОНОРАМИ ЭЛЕКТРОНОВ**

Л. И. Колесникова, Л. Ю. Русин, М. Б. Севрюк

Институт энергетических проблем химической физики РАН, г. Москва

Одним из основных факторов, препятствующих развитию фотовольтаических технологий на основе органических полимерных полупроводников, является недостаток динамической и статистической информации о взаимодействии носителей заряда с фрагментами полимерной цепи в потенциальных полостях, образованных надмолекулярной структурой полимера. В качестве модельной задачи мы рассмотрели движение классических ионов Cs⁺ и Cl⁻ в сферической полости (радиуса 600 Бор) и в эллипсоидальной полости (с полуосями 600, 375 и 150 Бор), в которых также могут присутствовать неподвижные цилиндрические “перемычки”, моделирующие поперечные связи между макромолекулами в сетчатых полимерах, и положительно или отрицательно заряженные сферические включения (“ядра”), моделирующие соответственно акцепторы или доноры электронов. Предполагалось, что ионы (связанные стандартным потенциалом взаимодействия в молекуле CsCl) отталкиваются от преград — стенки полости, перемычек и ядер — по закону мгновенного упругого удара. Исследован также случай, когда при каждом ударе о преграду некоторая доля кинетической энергии иона диссипирует.

Обнаружен ряд статистических закономерностей, относящихся к соударениям ионов с преградами и к актам диссоциации молекулы (изменения знака внутренней энергии E пары Cs⁺-Cl⁻ с отрицательного на положительный) и рекомбинации ионов (изменения знака E с положительного на отрицательный). В отсутствие заряженных ядер акты диссоциации и рекомбинации могут происходить только при столкновениях ионов с преградами (так как в промежутках между столкновениями энергия E сохраняется). При наличии же ядер, напротив, акты осуществляются главным образом “в полете” — в промежутках между соударениями ионов с преградами. Часть результатов расчетов (без диссипации энергии и отрицательно заряженных ядер) изложена в статье Л. И. Колесникова, Л. Ю. Русин, М. Б. Севрюк, Химическая физика, 2010, т. 29, № 10, с. 66–76.