Kufa Journal for Chemistry Vol.(2),No.(1), pp. 87-100, 2016

Molecular Design, Geometry Structures and Stability for Pyrrole Substitutes, DFT study as Organic Solar cell system (One Anchoring System)

Sadiq M-H. Ismael, Jasim M. Al-shawi, Kawkab A. Hussain
Department of Chemistry – College of Education for Pure Science
University of Basrah – Iraq.

الخلاصة :

تم في هذا البحث دراسة نظرية للخصائص الالكترونية والتركيبية والفعالية الكيميائية للبايرول المعوض (S1, S2, S3, and S4). بواسطة كيمياء الكم. انجزت المواءمة الهندسية للتراكيب وفق نظرية دالة الكثافة الالكترونية DFT بطريقة B3LYP وعند مستوى المجموعة الاساسية DVZ(d) أظهرت الدراسة أن الجزيئة (S2) تمتلك أعلى عزم لثنائي القطب مقارنة مع الجزيئات (S1,S3,S4) وتم حساب الخواص الالكترونية كطاقة المدار الجزيئية , LUMO, HOMO وقيمة ΔE والتي اظهرت ان استقرارية المركبات يكون (S4> S3> S2> S1). كذلك تمت في هذه الدراسة النظرية دراسة تداخلات المانح المتقبل الالكترونية لهذه المركبات من خلال ادخال مجاميع الالكترونية جانبية مختلفة لدراسة تأثيرها على التركيب الالكتروني HOMO, LUMO, ΔE , الدراسة التركيبية و الالكترونية لهذه المركبات يمكن ان تساعد في تصميم مركبات كيميائية كفوءة ضوئيا. كذلك تم دراسة طاقات الامتزاز لهذه المركبات على سطح اوكسيد التيتانيوم . ووجد ان افضل طاقة امتزاز كان المركب S2.

Abstract

The theoretical electron properties of Pyrrole Substitutes (S1, S2, S3, and S4) were carried out by using quantum chemical calculations. The optimized structures were obtained by the Density Functional Theory DFT/B3LYP level of theory using the basis set DVZ(d). The optimized structures of compounds have the global minimum energy. It was found that the dipole moment of compound (S2) have high values compared with the Compounds (S1,S3,S4). Global descriptors such as the MO energies of HOMO, LUMO levels and *ΔE*, were determined and used to identify the differences in the stability and reactivity of compounds. In general, the calculated values lead to the conclusion that on the one hand the stability of the compounds are S4> S3> S2> S1. On the other hand, the theoretical study of novel acceptor donor organic materials based on these compounds has been investigated. Different electron side groups were introduced to investigate their effects on the electronic structure; HOMO, LUMO and energy gap. The structural and electronic study as shown in this paper in hand for these compounds could help to design more efficient functional photovoltaic organic materials. the adsorption energy between the compounds and the TiO_2 surface was studied. The most suitable adsorption configurations high value of adsorption energy was compound S2.

Keywords: Alkyl Chain Substituted, Pyrrole Substitutes, Structural and Electronic Properties, DFT/B3LYP, Band Gap.