

между ними  $\approx 100$  нм. На снимках сколов также видно, что в порах располагаются УНТ диаметром  $\approx 14$  нм. Исследования электрической проводимости показали, что сопротивление синтезированных образцов составило 1–10 кОм. Указанный факт подтверждает прораствание УНТ на всю толщину мембраны АОА.

В то же время установлено, что полученные УНТ растут неупорядочено, имеют множество изгибов, хаотично ориентированы и спутаны между собой. Таким образом, для синтеза вертикальных УНТ в мембранах АОА необходимы дальнейшие исследования с увеличением размеров частиц катализатора, а также с возможным уменьшением диаметра нанопор.

## ELECTRONIC STRUCTURE OF POLY-3-HEXYLTHIOPHENE (P3HT) THIN FILM

Pitman A.L.<sup>1</sup>, Zhidkov I.S.<sup>2,3</sup>, Endo K.<sup>4</sup>, Kukharenko A.I.<sup>2,3</sup>, Kucherov A.A.<sup>2\*</sup>,  
Kurmaev E.Z.<sup>3</sup>, Moewes A.<sup>1</sup>, Achilleas S.<sup>5</sup>, Choulis S.A.<sup>5</sup>, Cholakh S.O.<sup>2</sup>

<sup>1)</sup> University of Saskatchewan, Saskatoon, Saskatchewan, Canada

<sup>2)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>3)</sup> Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia

<sup>4)</sup> Tokyo University of Science, Kagurazaka, Shinjuku-ku, Tokyo, Japan

<sup>5)</sup> Cyprus University of Technology, Limassol, Cyprus

\*E-mail: a.a.kucherov.mail@gmail.com

The results of measurements of X-ray emission (XES), X-ray absorption (XAS) and X-ray photoelectron (XPS) spectra of P3HT/ITO/Glass sample and density functional theory (DFT) calculations are presented. The XES spectra were measured at Beamline 8.0.1 at the Advanced Light Source, while the XAS spectra were measured at the SGM beamline at the Canadian Light Source. XPS measurements were performed employing PHI XPS Versaprobe 5000 spectrometer (ULVAC-Physical Electronics) equipped by  $C_{60}^+$  cluster source ion gun specially designed for surface cleaning of organic compounds. The 1st geometric structure of  $(C_{10}H_{14}S)_3$  for P3HT polymer model molecule was optimized using AM1 method of Winmopac software [1]. For the 2nd geometry-optimization, we selected the hybrid density functional theory (B3LYP) using 6-31G bases in GAUSSIAN 09 software. The experimental X-ray spectra and band gap estimation are compared with the electronic structure calculations of total and partial S 3s, S 3p, C 2s and C 2p-density states and calculated HOMO-LUMO gap.

This work is supported by Russian Foundation for Basic Research (Project 14-08-31088) and Ural Federal University in framework of financial support for young scientists.

1. Dewar M.J.S. et al., J. Am. Chem. Soc., 107, 3902 (1985)