

# Теоретическое Моделирование в Органической Нанопотонике

Александр Багатурьянц

- (1) *Федеральный Научно-Исследовательский Центр «Кристаллография и Фотоника», Центр фотохимии Российской Академии Наук, ул. Новаторов, 7а, Москва, 119421 Россия*
- (2) *Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», кафедра физики конденсированных сред (№ 67), Каширское шоссе, 31, Москва 115409 Россия*

Функциональные органические материалы широко используются в таких применениях фотоники, как органические светоизлучающие устройства (OLEDs), фотовольтаические устройства (солнечные батареи), и оптические хемосенсоры. Разработка новых перспективных материалов с хорошими характеристиками транспорта зарядов и переноса энергии, с хорошими эмиссионными свойствами и высокой термо- и фото-стабильностью является очень важной проблемой. Теоретическое предсказание этих характеристик позволяет выбрать и разработать материалы с наилучшими требуемыми свойствами.

В нашей работе методы многомасштабного атомистического моделирования применяются к исследованию возбужденных молекул в органических материалах и их взаимодействия с соседними молекулами. Такие взаимодействия могут приводить к образованию эксимеров и/или эксиплексов (димеров и молекулярных комплексов в возбужденных состояниях). Образование эксиплексов на границе раздела (интерфейсе) между слоями органических молекул в многослойных структурах, типичных для органических светоизлучающих устройств и для других устройств органической электроники и фотоники вносит существенный вклад в их спектр испускания. Исследование таких взаимодействий и образующихся комплексов представляет большой интерес для фотоники органических материалов. Применение теоретических методов атомистического моделирования к предсказанию свойств молекул в возбужденных состояниях особенно оправдано, поскольку прямое экспериментальное исследование свойств молекул в возбужденных состояниях крайне затруднительно.

В данной работе рассматривается разработка адекватных моделей сложных систем, содержащих возбужденные молекулы, выбор наиболее надежных методов и приближений для расчета таких молекулярных систем с учетом ближнего и дальнего окружения, а также разработке подходящих методов для описания процессов переноса заряда и/или возбуждения.

Кратко рассмотрены следующие этапы работы: (1) построение и использование библиотеки параметров приближения эффективных фрагментных потенциалов (EFP, Effective Fragment Potentials) для моделирования окружения люминесцентных допантов и транспортных молекул в слоях; (2) оценка точности получаемых результатов; (3) разработка программного комплекса для построения поляризуемого окружения с использованием библиотеки параметров приближения EFP; (4) исследование влияния поляризуемого окружения на положения триплетных и синглетных уровней люминесцентных допантов; (5) разработка и улучшение подходов к расчету и интерпретации спектров поглощения супрамолекулярных систем с использованием гибридных методов QM/MM; (6) исследование образования эксиплексов на границе раздела двух органических слоев с использованием метода молекулярной динамики с последующим расчетом свойств эксиплексов, образующихся на границе раздела двух органических слоев квантово-химическими методами; (7) выбор и разработка силовых полей для металлоорганических комплексов и молекулярно-динамическое моделирование таких систем с использованием полученных силовых полей; (8) разработка и улучшение вычислительных подходов, основанных на многоконфигурационных квантово-химических расчетах радиационных констант и констант интеркомбинационной конверсии; (9) исследование спин-смешанных состояний фосфоресцентных комплексов иридия(III), расчет констант излучательной фосфоресценции и анализ каналов безызлучательного тушения фосфоресценции.