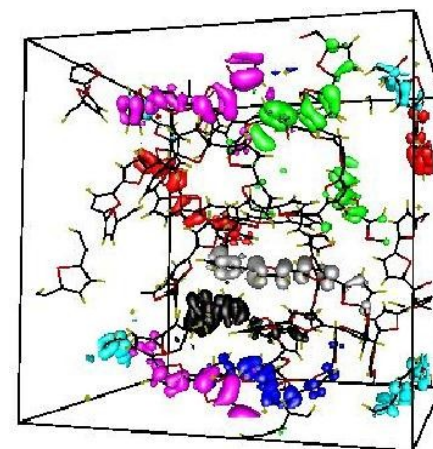
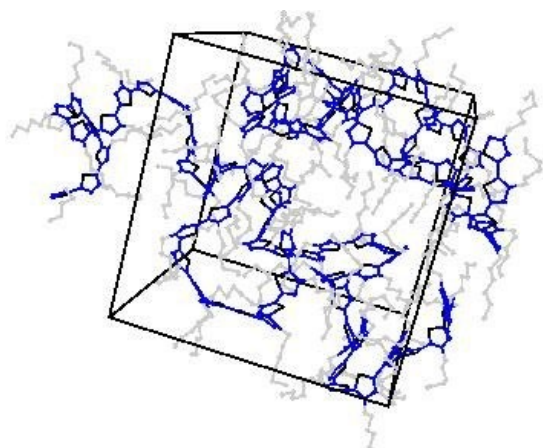


Органски материјали – симулације електронских особина и примене



Ненад Вукмировић

Лабораторија за примену рачунара у науци

Институт за физику, Београд

email: nenad@ipb.ac.rs

Физички факултет, 14. март 2011

Увод

- Дефиниција, особине значај и примене органских материјала.
- Методи за опис електронских стања у материјалу.
- Пример прорачуна електронских стања и симулације електронског транспорта у органским материјалима.

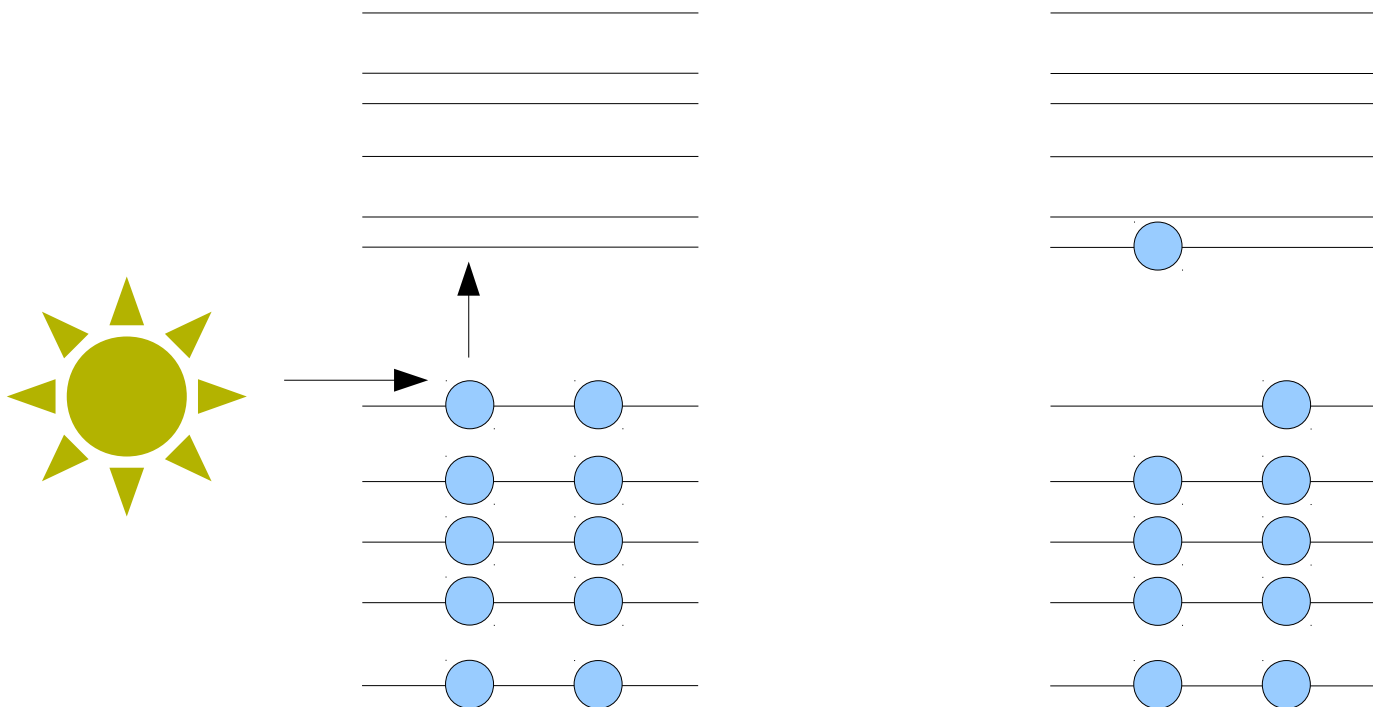
Сунчева енергија

- Земља прима енергију 3.85×10^{24} Ј годишње од Сунца.
- Светска потрошња енергије 2008. год. је била 4.74×10^{20} Ј.

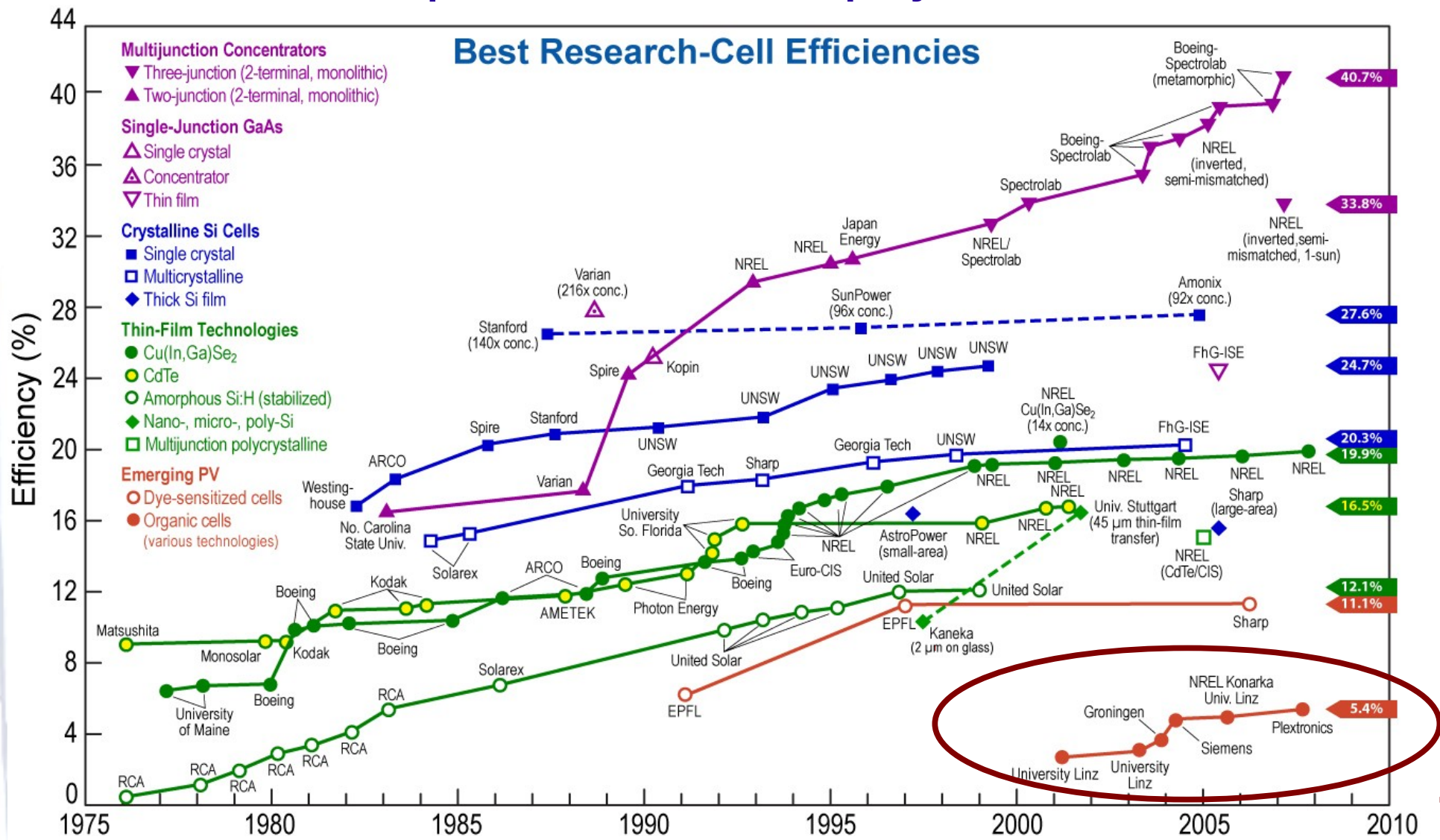


Како раде соларне ћелије?

- Упадна светлост креира носиоце наелектрисања.
- Носиоци наелектрисања треба да стигну до спољашњих котаката да би се добила струја.



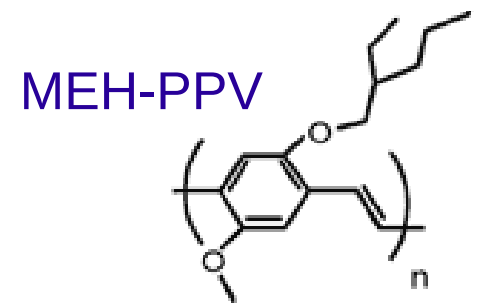
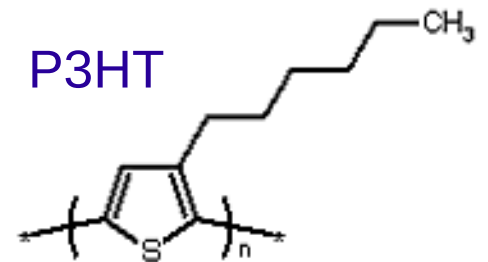
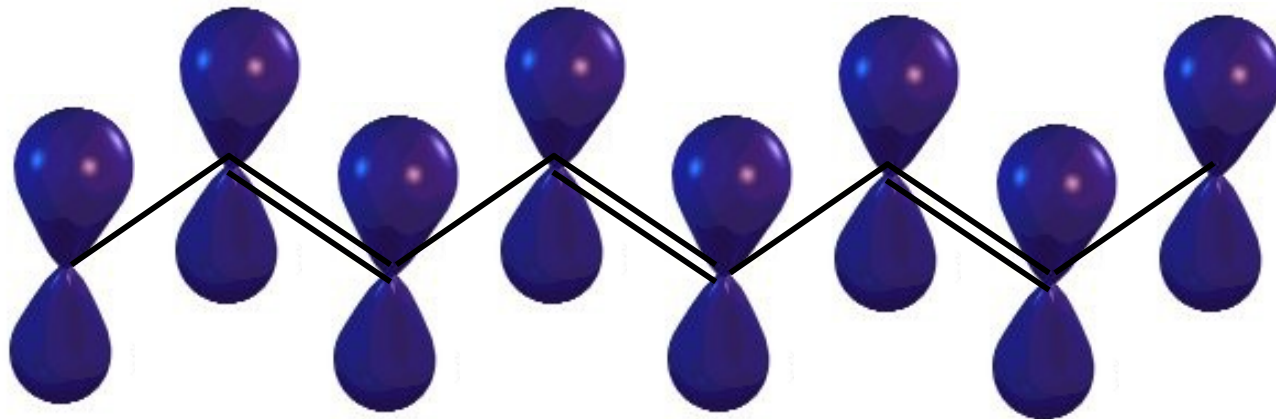
Тренутни статус соларних ћелија на бази органских материјала



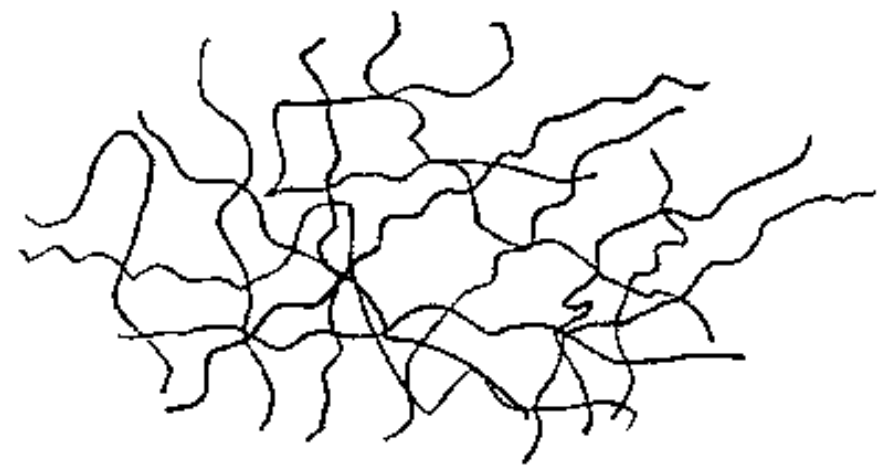
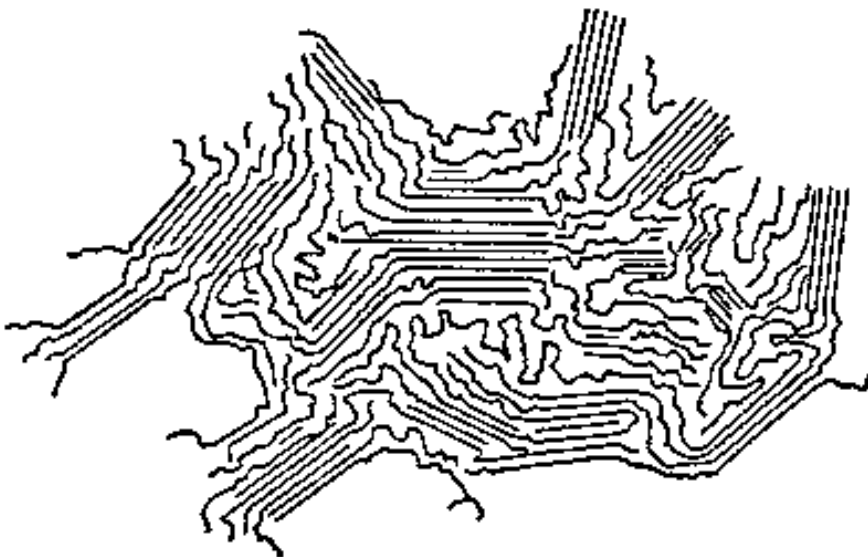
Rev. 11-07-07

Органски материјали

- Један ланац полимера:



- Ланци у реалном материјалу:



Предности и примене органских материјала

• Предности

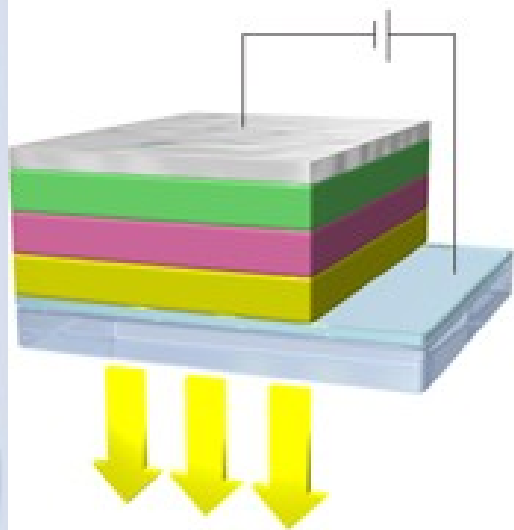
- јефтино се могу произвести
- лаки и савитљиви
- велике могућности синтезе различитих полимера

• Мане

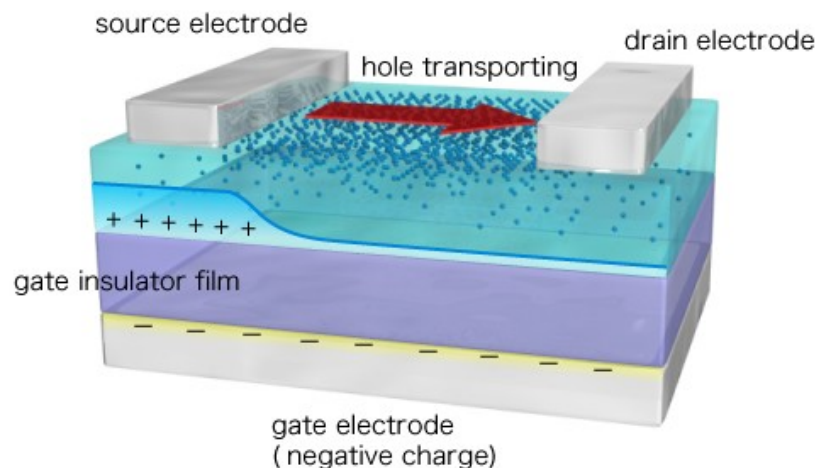
- мала покретљивост носилаца.
- осетљивост на UV.
- деградација са временом.

• Примене

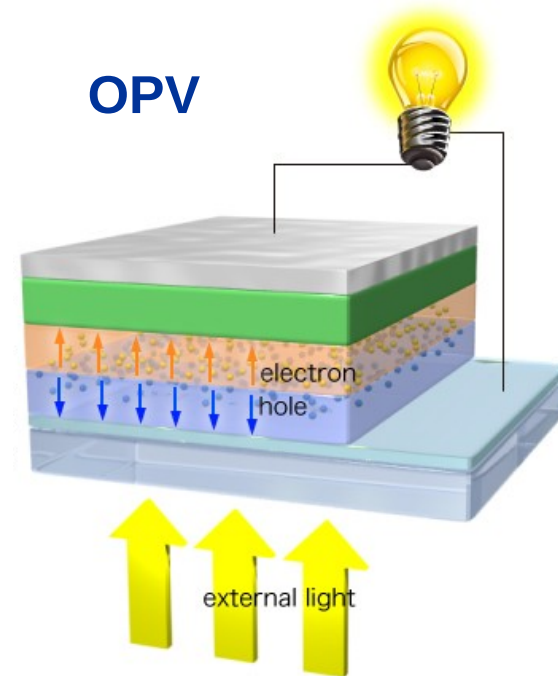
OLED



OFET



OPV



http://www.cstf.kyushu-u.ac.jp/~adachilab/research_b_e.html

Стање на тржишту

- Market for OLEDs (displays)
 - \$310M in 2008
 - \$4,400 M in 2015 (projection)
- Market for OFETs (RFID tags + backplanes)
 - \$16M in 2008
 - \$10,000M in 2015 (projection)
- Market for OSCs
 - \$0.5M in 2008
 - \$223M in 2015 (projection)

www.nanomarkets.net





The Nobel Prize in Chemistry 2000

Alan Heeger, Alan G. MacDiarmid, Hideki Shirakawa

- The Nobel Prize in Chemistry 2000
- Nobel Prize Award Ceremony
- Alan Heeger
- Alan G. MacDiarmid
- Hideki Shirakawa



Alan J. Heeger



Alan G. MacDiarmid



Hideki Shirakawa

The Nobel Prize in Chemistry 2000 was awarded jointly to Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid and Hideki Shirakawa *'for the discovery and development of conductive polymers'*.

Како предвидети особине материјала?

- Електрична проводност

- Топлотна проводност

- Апсорпција светлости

- Механичке особине – Јунгов модуло, еластичне константе

Шредингерова једначина за један електрон

- Временски зависна Шредингерова једначина

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi$$

- Временски независна Шредингерова једначина

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \cdot \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi$$

- E је енергија честице

Опис система честица у квантној физици

- Систем честица у класичној физици
 - За опис су довољне координате $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$.
- Систем честица у квантној физици
 - Описује се таласном функцијом $\Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$
 - $|\Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)|^2$ представља густину вероватноће налажења система честица са координатама $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$.

Шредингерова једначина за систем са више честица (реалан материјал) (1)

- Координате (непокретних) атома: $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_K$
- Временски независна Шредингерова једначина

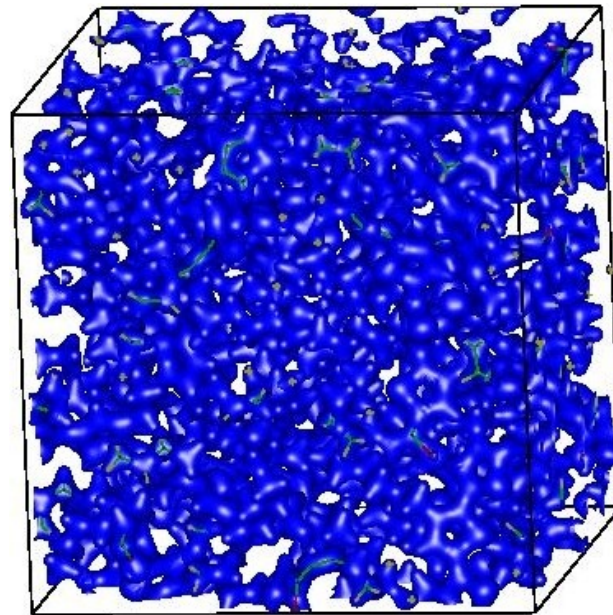
$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + \dots + \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_N^2 \right] \psi + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \psi + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{(-Ze^2)}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} \psi = E \psi$$

Шредингерова једначина за систем са више честица (реалан материјал) (2)

- Ова једначина (у принципу) описује све материјале!
- Проблем:
 - Потребно је наћи функцију $3N$ променљивих.
 - Такву функцију је чак немогуће и меморисати у компјутеру.
- Неопходне су апроксимације при решавању ове једначине.

Свођење на једночестични проблем – density functional theory (1)

- Хоенберг-Кон теорема (1964):
 - Густина укупног електронског наелектрисања једнозначно одређује све особине система [тима и таласну функцију $\Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$].



Свођење на једночестични проблем – density functional theory (2)

- Кон-Шамова једначина (1965)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{atom}(\vec{r}) + \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \right] \psi(\vec{r}) + V_{xc}(\rho) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Интеракција електрона са језгрима

Електростатичка интеракција између електрона

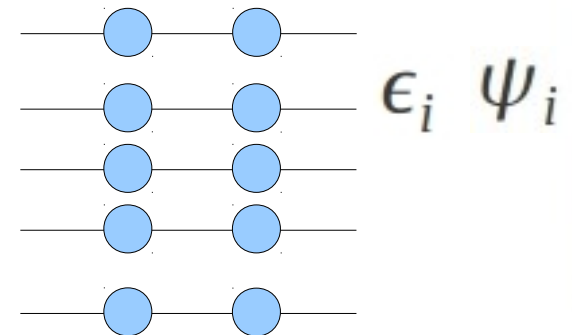
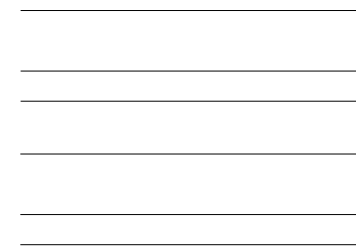
Остатак који зависи само од густине електронског наелектрисања, али израз за овај члан није познат, па се мора апроксимирати.

Самосагласно решавање једначина

$$\rho(\vec{r})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_{\text{eff}}(\rho)\right]\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

$$\rho(\vec{r}) = -e \sum_{\text{occ}} |\psi_i(\vec{r})|^2$$





The Nobel Prize in Chemistry 1998

Walter Kohn, John Pople

▶ The Nobel Prize in Chemistry 1998 ▼

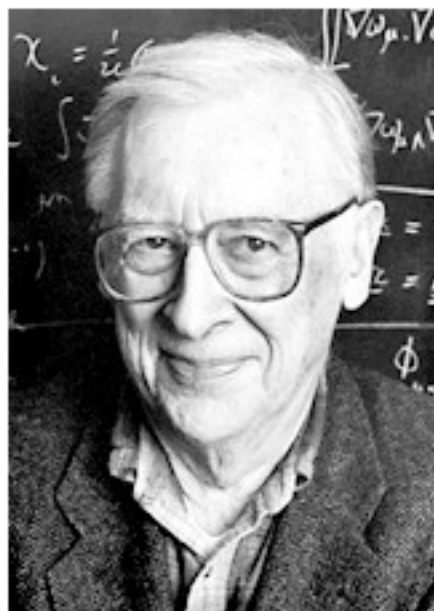
Nobel Prize Award Ceremony ▼

Walter Kohn ▼

John Pople ▼



Walter Kohn



John A. Pople

The Nobel Prize in Chemistry 1998 was divided equally between Walter Kohn "for his development of the density-functional theory" and John A. Pople "for his development of computational methods in quantum chemistry".

Доступни компјутерски програми

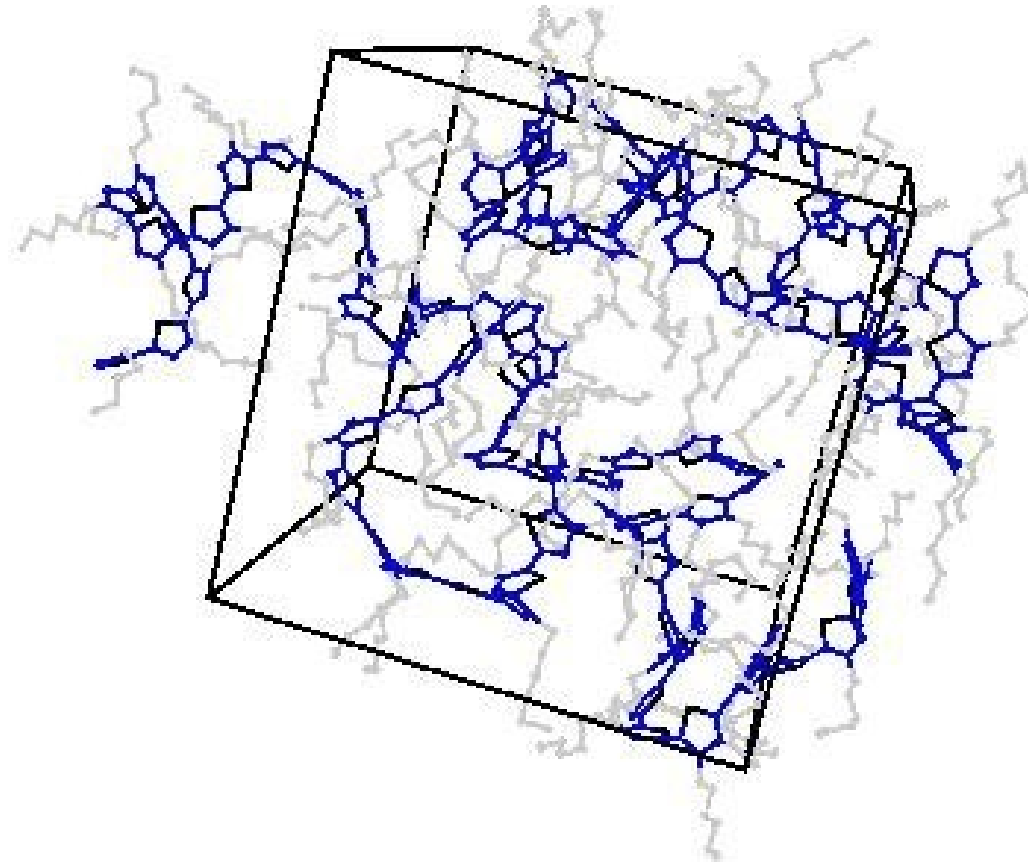
- Улаз – координате атома; Излаз - енергије и таласне ф-је.

Package	License [†]	Lang.	Basis	Periodic [‡]	Mol. mech.	Semi-emp.	HF	Post-HF	DFT
ABINIT	GPL	Fortran	PW	3d	Yes	No	No	No	Yes
ACES II	Academic	Fortran	GTO	No	No	No	Yes	Yes	Yes
ACES II MAB	Academic	Fortran	GTO	No	No	No	Yes	Yes	No
ADF	Commercial	Fortran	STO	Any	Yes	Yes ⁴	Yes	No	Yes
Atomistix ToolKit	Commercial	C++	NAO	3d	Yes	No	No	No	Yes
BigDFT	GPL	Fortran	Wavelet	Any	Yes	No	No	No	Yes
CADPAC	Academic	Fortran	GTO	No	No	No	Yes	Yes	Yes
CASINO (QMC)	Academic	Fortran	GTO / PW / Spline / Grid / STO	Any	No	No	Yes	Yes	No
CASTEP	Academic (UK) / Commercial	Fortran	PW	3d	Yes	No	Yes ⁵	Yes	Yes
CFOUR	Academic	Fortran	GTO	No	No	No	Yes	Yes	No
COLUMBUS	Academic	Fortran	GTO	No	No	No	Yes	Yes	No
CONQUEST	Academic (UK)	Unknown	Unknown	Unknown	Unknown	Unknown	Unknown	Unknown	Unknown
COSMOS	Commercial	Unknown	Unknown	Unknown	Yes	Yes	No	No	No
CP2K	GPL	Fortran 95	Hybrid GTO / PW	Any	Yes	Yes	Yes	No	Yes
CPMD	Academic	Fortran	PW	Any	Yes	No	Yes	No	Yes
CRYSTAL	Academic (UK) / Commercial	Fortran	GTO	Any	Yes	No	Yes	No	Yes

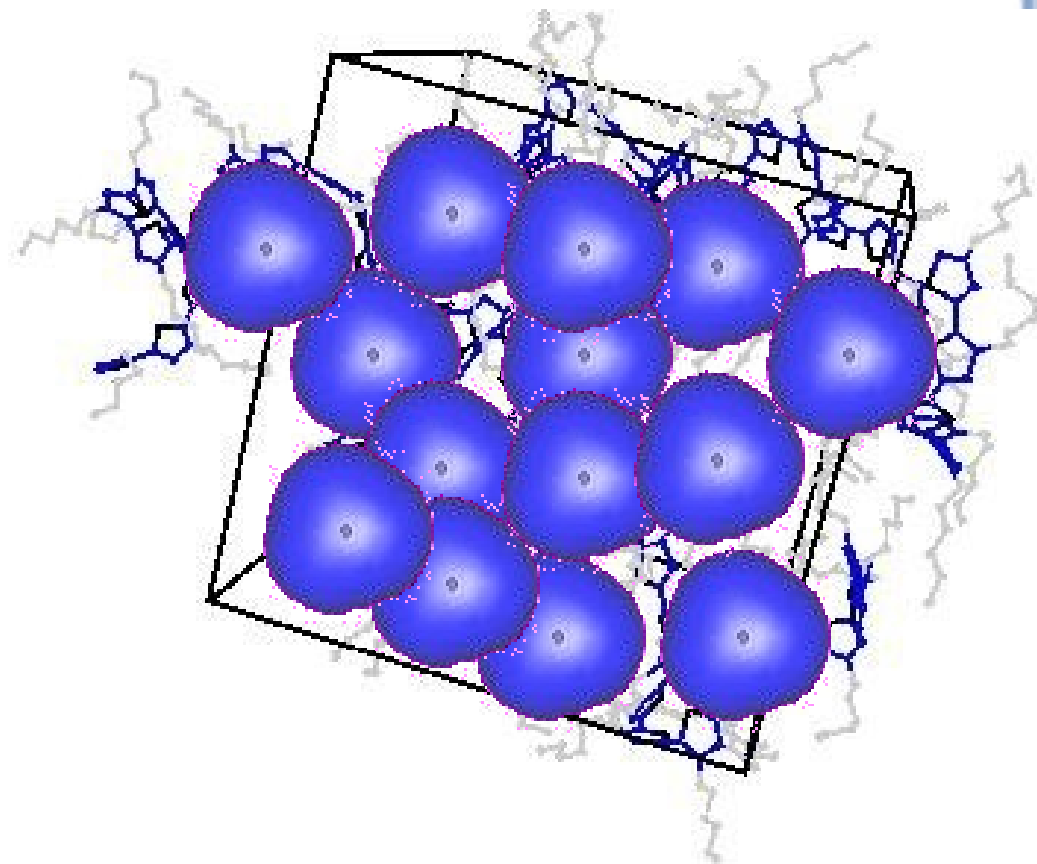
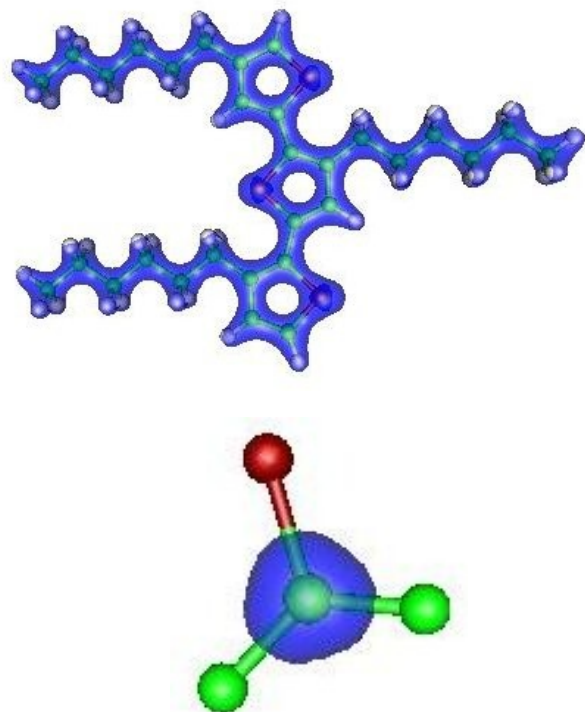
http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quantum_chemistry_and_solid_state_physics_software

Атомска структура (координате атома)

- Класична млекуларна динамика.
- Симулирано каљење.



Метод крпљења нелектрисања (Charge patching method)



$$m_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) = \frac{w_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A)}{\sum_B w_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B)} \rho(\mathbf{r})$$

$$\rho_{patch}(\mathbf{r}) = \sum_A m_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A)$$

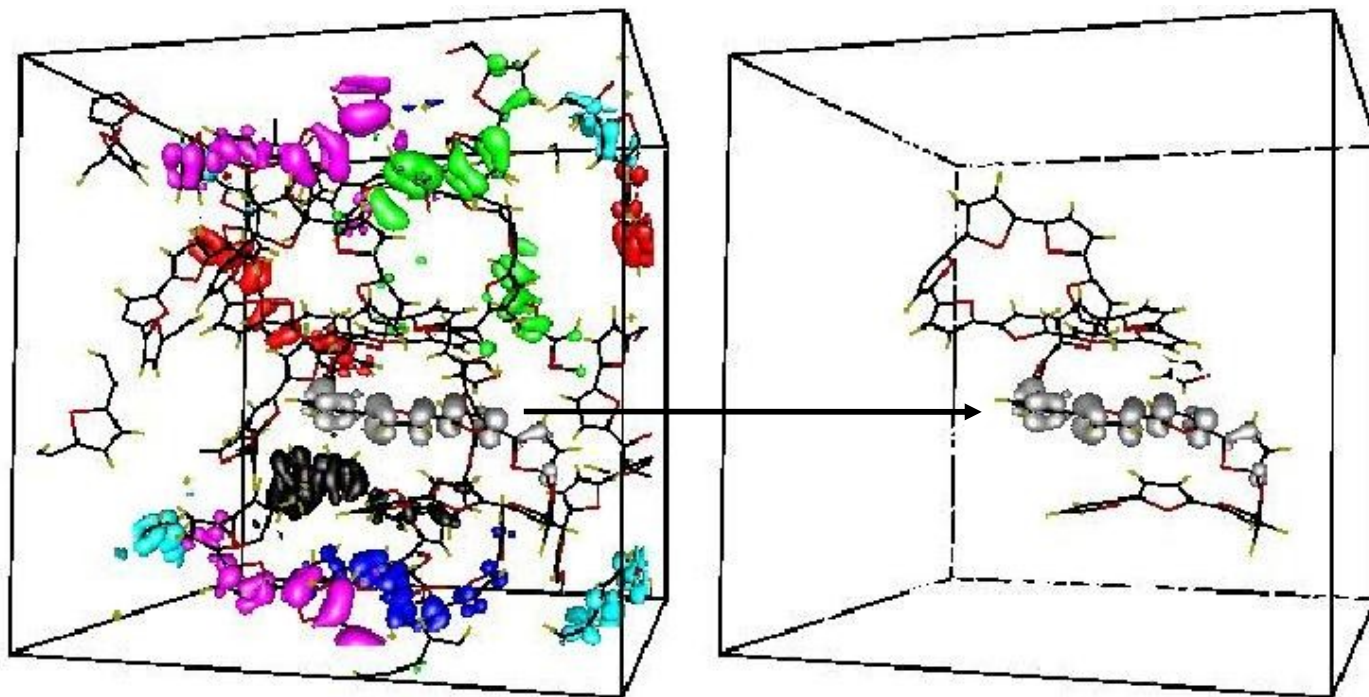
N. Vukmirović and L.-W. Wang, J. Chem. Phys. 128, 121102 (2008)

Електронска структура (енергије нивоа и таласне функције)

- Стања у РЗНТ полимеру:
 - локализована на неколико (3-6) прстенова полимера.

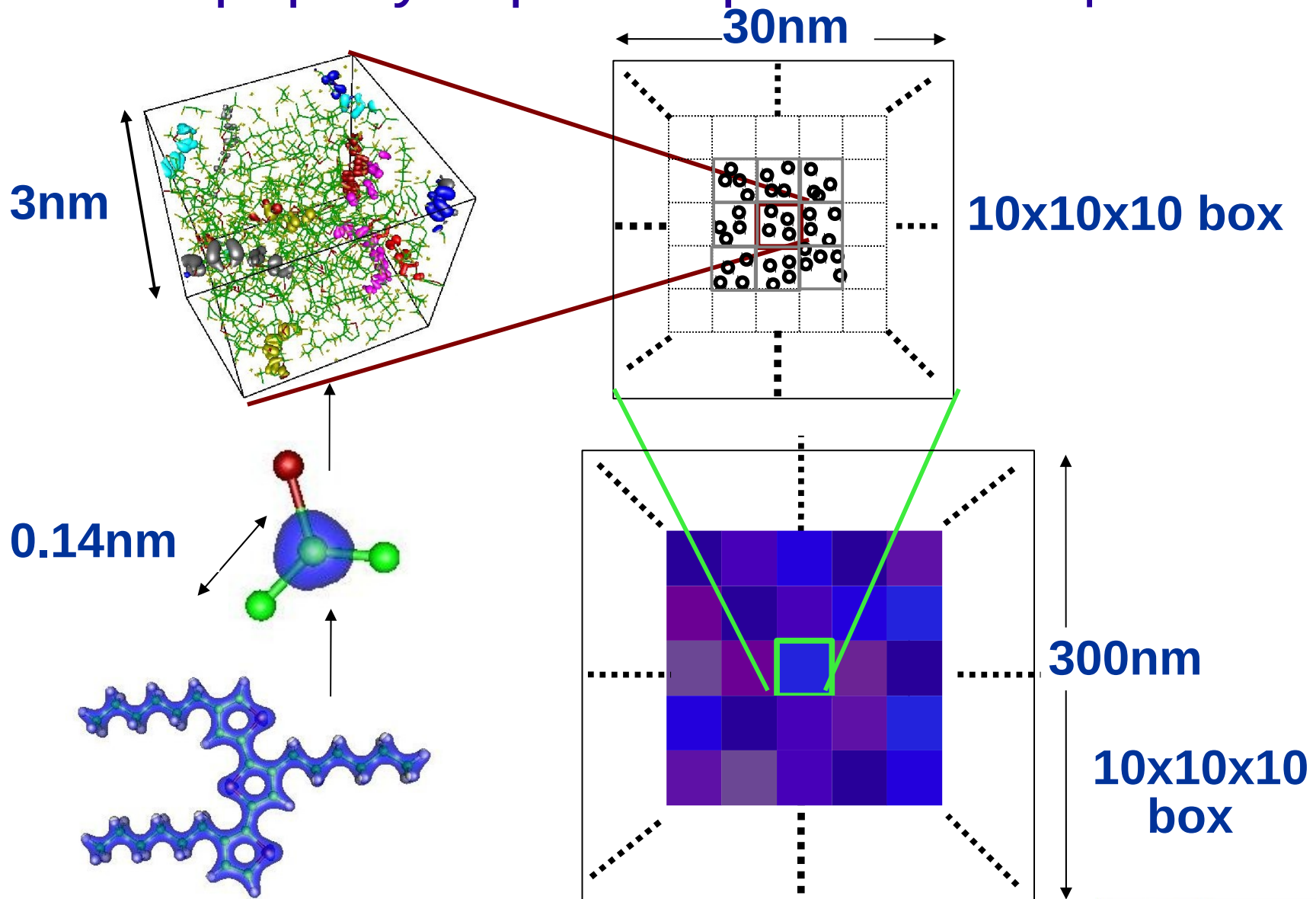
РЗНТ – 5 ланаца са по 20 прстенова (2510 атома)

blue: 18.910eV
green: 18.888eV
cyan: 18.755eV
red: 18.690eV
pink: 18.682eV
black: 18.675eV
white: 18.654eV



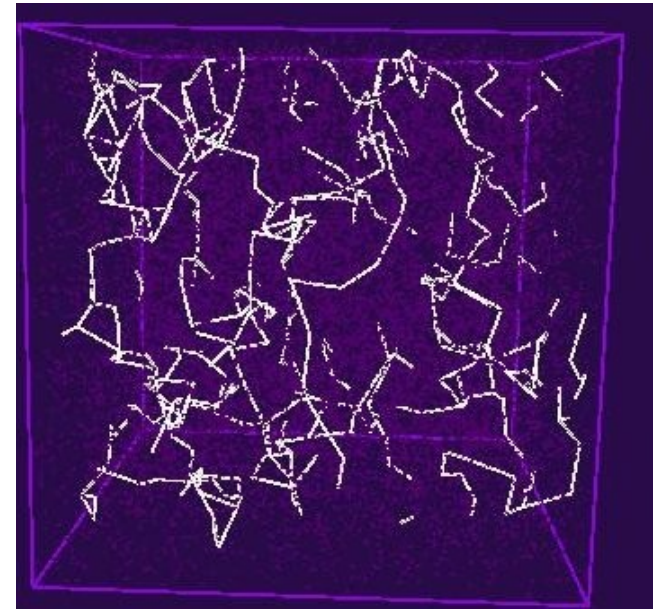
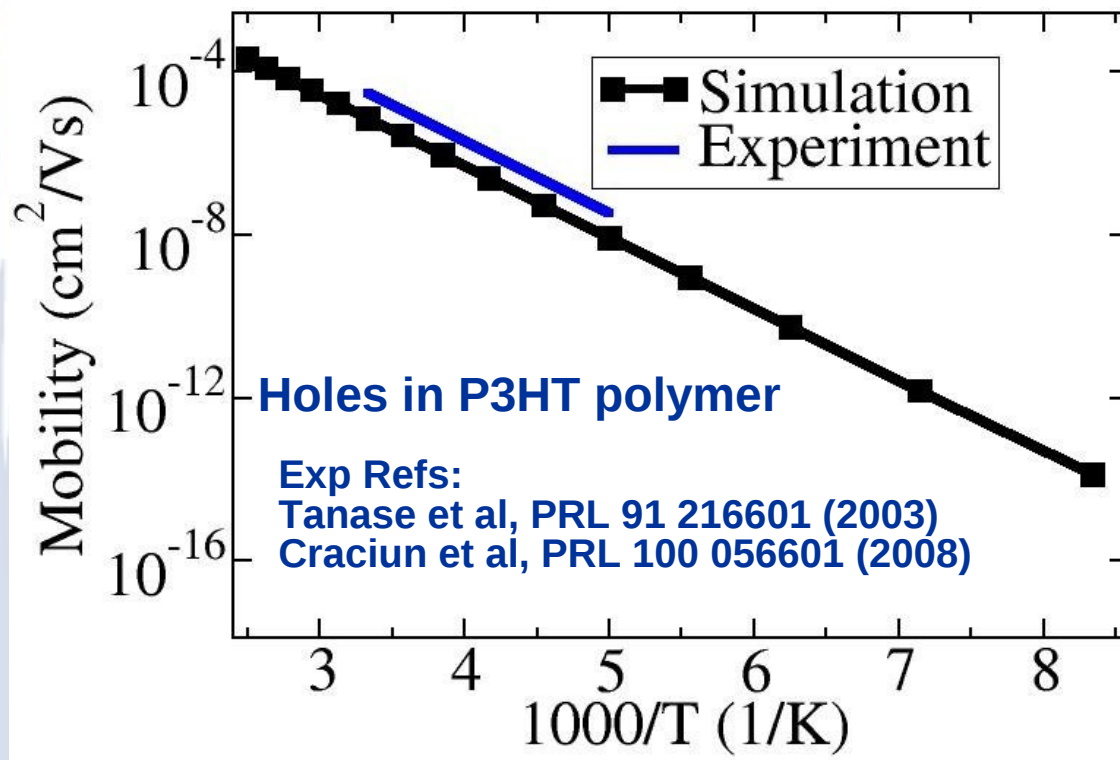
N. Vukmirović and L.-W. Wang, J. Phys. Chem. B 113, 409 (2009)

Симулација на више дужинских скала за прорачун транспорта носилаца



N. Vukmirović and L.-W. Wang, Nano Lett. 9, 3996 (2009)

Покретљивост носилаца



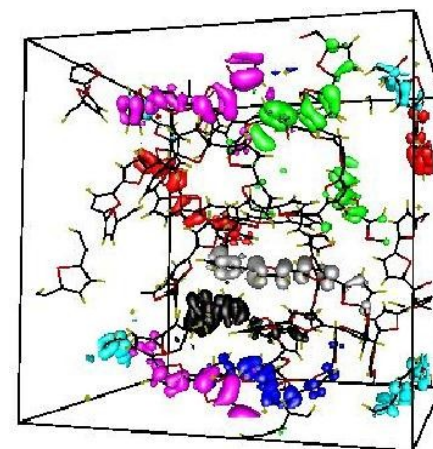
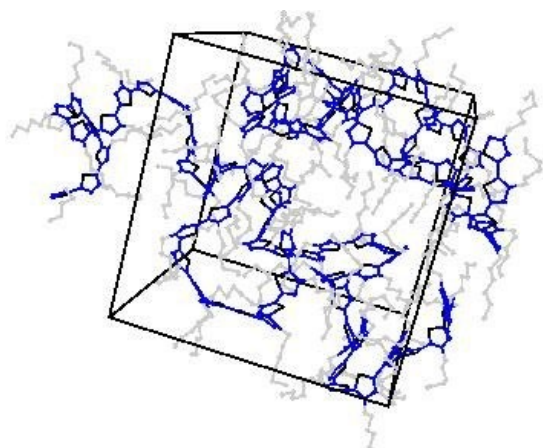
- Микроскопски увид у путање струје у материјалу.



http://www.colourlovers.com/uploads/2008/02/sydney_lightning_bolts.jpg

N. Vukmirović and L.-W. Wang, Nano Lett. 9, 3996 (2009)

Органски материјали – симулације електронских особина и примене



Ненад Вукмировић

Лабораторија за примену рачунара у науци

Институт за физику, Београд

email: nenad@ipb.ac.rs

Физички факултет, 14. март 2011