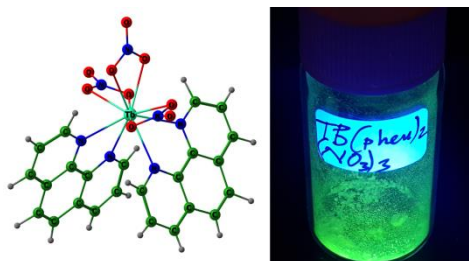


## LANTMOD: Квантовохимично моделиране на фотофизични свойства на комплекси на Ln(III) с органични хромофори

Институт по обща и неорганична химия - Българска академия на науките

Ивелина Георгиева, Цветан Захариев, Наташа Трендафилова



**Фигура 1:** Комплекс на Tb(III) – молекулен модел (ляво) и луминесценция (дясно).

### ❖ Описание

Дизайнът на лантанидни комплекси с антена-хромофори, с приложение за луминесцентни устройства, включва подбор на нови фото-органични системи, които имат висок коефициент на моларна абсорбируемост и ефективен пренос на енергия във възбудено състояние върху централния лантаниден йон. С помощта на теоретичен подход, комбиниращ квантовохимични изчисления, емпирични и Judd-Ofelt и Malta модели се разработват ефективни Ln(III)-базирани оптични материали с оглед на постигане на стабилна структура с висок луминесцентен квантов добив. За геометричната оптимизация и симулация на спектрите на възбуждане са използвани DFT/TDDFT методи, а за оценка на силата на спин-орбиталното взаимодействие в комплексите – мултиреферентни *ab initio* методи. Теоретичните изследвания се провеждат в тясна връзка с експерименталните измервания. За изчислителния протокол се използват програмните пакети Gaussian16-RevC.01 [1] и ORCA4.1.2 [2]. Задачите са разработени от екип на Лабораторията по Теоретична и изчислителна химия към ИОНХ-БАН, в сътрудничество с екип от Факултета по химия и фармация към СУ „Св. Климент Охридски“.

### ❖ Използване на инфраструктурата

Квантовохимичните изчисления са проведени на суперкомпютъра Авитохол, който се намира в НРС центъра на ИИКТ-БАН [3] и се поддържа от Националния център за високопроизводителни и

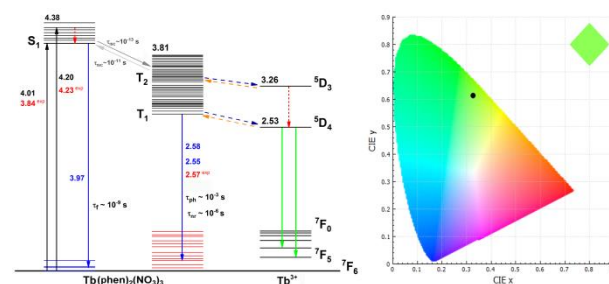
разпределени пресмятания (НЦВРП), обект на националната пътна карта за научни инфраструктури (НПКНИ) [4]. Резултатите са получени с използване до 10 изчислителни възли (сървъри) платформата HP Cluster SL250S GEN8, всеки с по 2 Intel Xeon E2650v2 процесора и 2 копроцесора Intel Xeon Phi 7120P.

### ❖ Резултати и бъдеща работа

Средният времеви период за една задача е 5-7 дни. За съжаление, Gaussian и ORCA не поддържат паралелизация на задачите на повече от 1 изчислителен възел. Получени са следните резултати:

- Предсказване на енергетичните диаграми и механизмите на електронна релаксация, след възбуждане с UV-светлина.
- Качествено описание на механизма на енергиен пренос в разглежданите системи. Установяване на факторите, отговорни за постигане на висок луминесцентен квантов добив.

Резултатите са обобщени в 2 статии [5,6].



**Фигура 2:** Диаграма на Jablonski (ляво) и хроматична диаграма (дясно).

Използваната изчислителна стратегия е разширена към комплекси на Ln(III) с фосфиноксидни и дитиокарбаматни хромофори.

1. <http://gaussian.com/>
2. <https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>
3. <http://www.iict.bas.bg/avitohol/>
4. <http://nchdc.acad.bg/>
5. Georgieva et. al. *Spectrochimica Acta A* 2020, 240, 118591.
6. Zahariev et.al. *Dyes and Pigments* 2021, 185, 108890.