

## MAZO MOLEKULU OLIGOMĒRU JONIZĀCIJAS ENERĢIJAS UN ELEKTRONTIEKSMES ATSAUCES VIRMSU PĒTĪJUMI

Igors Mihailovs<sup>1,2</sup>, Aivars Vembris<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

<sup>2</sup>*Rīgas Tehniskās universitātes Lietišķo dator sistēmu institūts*

Organisko materiālu īpašību raksturošanai svarīgi lielumi ir elektronu enerģētiskie līmeņi materiālā. Eksperimentā visbiežāk tiek iegūta šo līmeņu sliekšņa vērtība, kamēr aprēķinā – vidējā vērtība. Parasti, lai noteiktu sliekšņa vērtības, tiek pielietotas sarežģītas vairāklīmeņu modelēšanas metodes, kas prasa milzīgus datorresursus. No otras puses, noteikt sliekšņa vērtības var, vienkārši optimizējot molekulu savstarpējo novietojumu nevis pēc enerģijas, bet pēc attiecīgā līmeņa vērtības.

Šajā pētījumā tiek apskatītas mazo organisko molekulu jonizācijas enerģijas (cauruma polarona) un elektrontieksmes (elektrona polarona) atsaucēs virsmas atkarībā no molekulu savstarpējā novietojumā. Tika konstatēts, ka minēto enerģētisko līmeņu izmaiņas ir daudz vairāk atkarīgas no monomēru savstarpējā izvietošanas nekā sistēmas pilnā enerģija. Pie kam, ir novērojamas lielas atšķirības ne tikai starp līmeņu atkarības no šī novietojuma, bet arī, aprēķinot šos līmeņus ar dažādām kvantu ķīmijas metodēm.

## EXPLORATION OF THE RESPONSE SURFACES OF IONIZATION ENERGY AND ELECTRON AFFINITY FOR SMALL MOLECULE OLIGOMERS

Igors Mihailovs<sup>1,2</sup>, Aivars Vembris<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

<sup>2</sup>*Institute of Applied Computer Systems, Riga Technical University*

In characterization of organic materials, important properties are the electron energy levels in the material. In the experiment, most often the threshold value is obtained, while in the calculations – the average one. Usually, to obtain the threshold values computationally, sophisticated multilevel modelling methods are used, with enormous consumption of computing resources. On the other hand, these levels can be obtained just by optimizing the mutual orientation of molecules not by the energy but by the values of said electronic energy levels.

In this work, the response surface of the ionization energy (the hole polaron) and the electron affinity (the electron polaron) to the mutual position of monomer molecules is explored for small organic molecules. It was concluded that the dependence of the energy levels on the mutual positioning of molecules is much more pronounced than that for the total energy. Moreover, there are significant differences in this dependence both between the different polarons and the quantum chemical method selected for their computation.

The financial support of ISSP Student and Young Scientist Grant is greatly appreciated.