



# 量子材料科学中心 International Center for Quantum Materials Weekly Seminar

Modeling organic and polymeric materials:  
transport, photovoltaic and light-emittings



## Zhigang Shuai

Department of Chemistry, Tsinghua University

**Time:** 4:00 pm, Sept. 12 2012 (Wednesday)

**时间:** 2012年9月12日 (周三) 下午 4:00

**Venue:** Conference Room A (607), No. 5 Science Building

**地点:** 理科五号楼607会议室

### Abstract

Organic and polymeric materials present interesting opto-electronic functions. I describe here some recent progresses in theoretical modeling of charge and thermal transports by both self-trapped charge and delocalized band [1], photovoltaic processes by kinetic Monte-Carlo simulation for both charges and excitons [2], and light-emitting quantum efficiency and spectrum by thermal correlation function formalism involving combined non-adiabatic and spin-orbit couplings [3].

### References

- [1] Adv. Mater. 2012, 24, 3568; Adv. Mater. 2011, 23, 1145; J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 17728; Phys. Rev. B 2009, 79, 115203.  
[2] J. Chem. Phys. 2011, 134, 124102; J. Phys. Chem. B 2010, 114, 36.  
[3] J. Compt. Chem. 2012, 33, 1862; J. Phys. Chem. A. 2010, 114, 7817; J. Am. Chem. Soc. 2007, 129, 9333.

### About the Speaker

帅志刚，男，1962年8月出生于江西。从事光电功能材料性能预测与分子设计，发展了若干理论方法，并直接得到应用。总共发表SCI论文220多篇，他引5800多次，H-因子=41。主要贡献有：

(1) 提出了一种新的电子关联效应，是导致电致发光过程中单线态激子形成率超过三线态的根源，从而使得高分子电致发光的内量子效率可以超过25%的自旋统计极限，得到国际工业界和学术界关注；

(2) 在国际上率先建立了量子化学密度矩阵重整化群方法；

(3) 发展了多振动模式耦合的无辐射跃迁路径积分理论，有效地预测有机分子发光效率，并解释聚集诱导发光的奇异现象；

(4) 发展了强电-声子耦合的电荷传输理论和第一性原理预测有机传输材料的载流子迁移率的计算方案；发展了计算聚合物光伏器件的模拟方法；

(5) 发展了关联电子体系激发态结构理论与非线性响应理论，包括耦合簇运动方程和多参考组态相互作用的方法及其并行计算程序，并应用于计算大分子体系的激发态与非线性光学系数和非线性光吸收截面，得到国际上的关注。