

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2020 г. по 30.06.2021 г.

по проекту «**Новые электролюминесцентные материалы для создания высокоэффективных органических светодиодов (OLEDs)**»,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 17-73-20012

Руководитель: д-р хим. наук Валиев Рашид Ринатович

1. Созданы эффективные органические светодиоды на базе молекул гетеро[8]циркуленов с внешней эффективностью 3%. Такие светодиоды дают излучение в зеленом диапазоне при 12 вольт имеют яркость 16000 кд/м². Кроме того, были созданы QLED (с участием квантовых точек) устройства на базе данных молекул, где гетеро[8]циркулены использовались в качестве хост-матриц. С учетом того, что такие молекулы достаточно стабильны они могут быть использованы в качестве G-слоя (зеленый слой) в RGB дисплеях.

2. Разработан эффективный фотофизический метод для расчета константы скорости внутренней конверсии с учетом эффекта ангармоничности колебаний. Показано, что эффект ангармоничности колебаний всегда играет существенную роль именно для процесса внутренней конверсии, когда энергии электронных переходов больше чем 25000 см⁻¹. Он также играет существенную роль, когда акцептирующие моды являются X-H (X = C, N и O) моды. На самом деле, роль эффекта ангармоничности колебаний выше 25000 см⁻¹ обусловлена этими же модами. Метод был применен также к дейтерированным молекулярным структурам нафталина и антрацена, порфина, тетрафенилпорфирина. Результаты расчетов показали, что между S1 и S2 электронными состояниями молекул нафталина и антрацена имеется сильное неадиабатическое смешивание: 250 см⁻¹ и 50 см⁻¹. Учет этого факта позволяет получить корректные значения констант скоростей электронных переходов и квантовых выходов флуоресценции. Для молекул порфина, тетрафенилпорфирина данный эффект ничтожен.

3. Синтезированы новые пералофенильные комплексы одновалентного золота. Эти комплексы обладают интенсивной фосфоресценцией даже при комнатной температуре, а также обладают эффектом TADF (термически активированная замедленная флуоресценция). Теоретические расчеты показывают, что обратная интеркомбинационная конверсия с первого возбужденного триплетного электронного состояния на первое синглетное возбужденное электронное состояние имеет значение $2.2 \cdot 10^8$ с⁻¹, а спин-орбитальное взаимодействие между ними равно 4 см⁻¹. Такой молекулярный комплекс является идеальным кандидатом для создания на его базе светоизлучающего устройства (LED).

4. Синтезированы вещества, обладающие трибоэлектрическим эффектом, который приводит к переносу протона в основном электронном состоянии и тем самым к увеличению квантового выхода данных веществ в 450 раз. В силу того, что данный эффект обратим на его основе были созданы устройства ввода и сканирования информации (QR-code) совместно с китайскими коллегами. Такие вещества также могут быть использованы в создании OLED-устройств. Работа опубликована в Nature Communications.