

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2017 г. по 30.06.2018 г.

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

Соглашение № 17-79-10081

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Валиев Рашит Ринатович

Проведены квантово-химические вычисления спектроскопических свойств двух изомеров тетрабензо[8]циркуленов с различными заместителями во внешнем периметре. Показано, что оба изомера одного и того же соединения обладают разными спектроскопическими свойствами, при этом в жидкой фазе доминирует изомер с глобальным минимумом, а в твердой фазе с локальным. Последний стабилизируется в кристаллической упаковке межмолекулярными силами взаимодействия. На основе полученных результатов была предложена новая концепция оптического тюнинга [8]циркуленов или изменения их оптических свойств путем конформационной изомеризации и контроля индекса ароматичности без изменения их молекулярного состава. Новая концепция позволила предложить новый дизайн [8]циркуленов, обладающих заметной флуоресценцией.

Проведены массовые квантово-химические расчеты фотофизических свойств молекулы тетраоксо[8]циркулена – главного представителя группы [8]циркуленов. Впервые однозначно было показано, что основным и единственным внутримолекулярным каналом тушения флуоресценции данной молекулы является внутренняя конверсия.

Разработан алгоритм вычисления констант скоростей внутренней и интеркомбинационной конверсий из первых принципов. Алгоритм был апробирован на широком классе соединений: 1) пиромитен (PM567); 2) псорален; 3) порфин; 4) полиацены; 5) комплексы иридия и алюминия ($\text{fac-Ir}(\text{ppy})_3$ и fac-Alq_3). Существенно расширено понимание фотофизических механизмов деактивации возбужденной электронной энергии в отмеченных молекулах, большинство из которых используются в технологии создания светоизлучающих диодов.

Впервые определены вероятности всех внутримолекулярных каналов деактивации возбужденной электронной энергии первого и второго синглетного и первого триплетного электронных состояний расширенных порфиринов. Была найдена связь между природой ароматичности и спектроскопией данных молекул. Квантово-химические расчеты фотофизических характеристик данных молекул с использованием *ab initio* и полуэмпирических методов полностью объяснили причину ультракороткого времени жизни (нс) первого триплетного электронного состояния антиароматических расширенных порфиринов.