

Сведения о выполненных работах
в период с 01.07.2021 г. по 30.06.2022 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. Разработан концепт создания красных, зеленых и синих OLED устройств на основе молекул гетеро[8]циркуленов. Наиболее эффективной схемой реализации создания красных OLED на этих молекулах является схема, в которой молекулы азатриокса[8]циркуленов являются хост-матрицей в QLED с CdSeS/ZnS. Таким образом, «красные» QLED устройства могут быть созданы на основе молекул гетеро[8]циркуленов. Классические гетеро[8]циркулены светят в синем диапазоне и при бензоаннелировании в зеленом диапазоне.

2. Получен рецепт создания эффективных OLED устройств различного цветового диапазона на базе одной молекулярной структуры – арена с замещением только гетероатомов на I, Br, Cl. Все перечисленные соединения демонстрируют эффективную агрегированно индуцированную флуоресценцию и фосфоресценцию (I).

3. Изучены спектроскопические свойства молекул полифлуоренов, на примере бифлуорена и трифлуорена. Молекулы полифлуоренов излучают свет в синем диапазоне и используются для создания OLED устройств. Впервые исследованы детально их электронные спектры поглощения и излучения. Результаты квантово-химических расчетов показали, что молекулы бифлуорена и трифлуорена демонстрируют ярко выраженную вибронную структуру в спектрах излучения и слабую вибронную структуру в спектрах поглощения. Моделирование вибронных спектров показало, что положение полос вибронных спектров согласуется с экспериментальными спектрами для обеих молекул. Установлено, что вибронная прогрессия обусловлена комбинацией низкочастотных мод, а также низкочастотных мод с промотирующей колебательной модой (~1650–1690 см⁻¹) и ее первым обертоном, связанными с колебаниями C-C связей в центральном скелете бензольных колец бифлуорена и трифлуорена.

4. Впервые с использованием мультиреференсных квантово-химических вычислений проведены расчеты энергий электронных состояний с различной мультиплетностью (синглеты, триплеты и дублеты) для огромных систем с точки зрения квантовой химии (более 100 атомов). Переносы энергии и электрона рассмотрены, как безызлучательные электронные переходы (внутренняя конверсия и интеркомбинационная конверсия) между этими электронными состояниями. Такой подход был реализован впервые с применением фотофизического кода, который был разработан в рамках настоящего проекта, и метода ХМС-QDPT2 в программе FIREFLY. С использованием наших теоретических результатов совместно с китайскими коллегами были созданы эффективные нанотрансмиттеры для различных нанотехнологических приложений, включая и OLED устройства. Работа опубликована в престижном журнале Chemical Engineering Journal с IF = 13.