

Сведения о выполненных работах  
в период с 01.07.2018 г. по 30.06.2019 г.

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

Соглашение № 17-73-20012

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

1. Найдена корреляция между индексом ароматичности, магнитными и спектроскопическими свойствами молекул гетеро[8]циркуленов. Показано, что сильно антиароматические гетеро[8]циркулены имеют в инфракрасной области интенсивный магнитно дипольный электронный переход. В неароматических гетеро[8]циркуленах он расположен в видимой области, главным образом в синей области электромагнитного спектра. В ароматических молекулах он отсутствует. Отмеченная корреляция не зависит от заряда молекулы. Таким образом, полученные новые знания по фундаментальным спектроскопическим свойствам молекул гетеро[8]циркуленов.

2. Впервые получены знания о фотофизических свойствах молекул гетеро[8]циркуленов с гетероатомами -Se и -Ge, которые важны для понимания процессов фосфоресценции. Проанализированы влияние неплоского макроцикла, спин-орбитального взаимодействия между T1 и 50 электронными состояниями на процесс фосфоресценции в данных молекулах. Вычислены все внутримолекулярные константы скоростей разгрузки возбужденной электронной энергии состояния T1. Таким образом, получено полное понимание природы излучения фосфоресценции данных молекул. На основе полученных данных показано, что в таких молекулах могут быть задействованы, как синглетные, так и триплетные экситоны, поэтому эффективность OLEDs устройств на основе этих молекул может быть выше, чем для устройств, созданных на классических представителях гетеро[8]циркуленов.

3. Проведены исследования вибронных свойств молекул bis[(1,2)(5,6)]indoloanthracene и biscarbazolo[3,4-a:3',4'h]anthracene, в которых присутствуют производные карбазала. Показана, что электронно-колебательные спектры данных молекул имеют сложную структуру, в которых вовлекаются колебания C-H связей. При этом производные карбазала (заместители) увеличивают стабильность данных молекул и расширяют полосы спектров излучения. Таким образом, получены новые знания о связи спектроскопических свойств данных молекул с их структурными характеристиками.

4. Созданы эффективные светоизлучающие диоды на основе цинковых комплексов и чистой органики. Показано, что электролюминесценция цинковых комплексов на основе Zn(DFP-SAMQ)2 обусловлена не только их флуоресценцией, но также эксиплексным излучением данных комплексов с молекулами транспортного слоя- NPD. Такие диоды являются прототипами устройств, которые могут быть

использованы в качестве источников излучения. Созданные светодиоды на основе азометин-цинковых комплексов имеют эксимерное и мономерно флуоресцентное излучение в голубой области электромагнитного спектра. Такие светодиоды имеют высокую эффективность и в целом созданы из дешевых материалов и являются конкурентоспособными на мировом рынке. OLED-устройства, созданные на основе дибензотиофеновых производных, обладают электролюминесценцией, которая формируется эффективно, как синглетными, так и триплетными экситонами, благодаря эффекту TADF. Для данных соединений была оценена главная характеристика TADF эффекта - обратная интеркомбинационная конверсия с использованием, созданного нашей группой фотофизического алгоритма.