

Сведения о выполненных работах и полученных научных результатах
в период с 14.08.2023 г. по 30.06.2024 г.

по проекту «**Новые механизмы получения эффективной
электролюминесценции для задач органической электроники**»,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 23-73-10081

Руководитель: канд. физ.-мат. наук Насибуллин Ринат Талгатович

1) Развита теория с помощью, которой можно вычислять константы скоростей электронных переходов внутренней и интеркомбинационной конверсий, радиационных переходов с использованием формализма квантовых температурно-зависимых функций Грина из первых принципов. Поэтому квантовый выход флуоресценции может быть вычислен на одном и том же уровне вычислительной теории, а именно с использованием одних и тех же методов квантовой химии. Данный подход позволяет рассматривать операторы возмущения полиномиального вида любой степени, что дает возможность использовать различные «дипольные» приближения n -го порядка для описания взаимодействия молекулы с внешним электромагнитным полем, включая свойства последнего (поляризация).

2) Создана модель для быстрой оценки константы скорости внутренней конверсии на основе формализма корреляционных функций. Вычисление константы скорости внутренней конверсии происходит с помощью интегрирования корреляционной функции, которая включает гармонически и ангармонические вклады мод, которые возбуждаются при конверсии возбужденной электронной энергии. Модель может быть применена для молекул, содержащие сотни атомов.

3) Разработана оригинальная теория влияния электрической и магнитной компонент электромагнитного поля на константу скорости внутренней конверсии при нахождении молекулы во внешнем электромагнитном поле. Показано, что константа скорости внутренней конверсии может изменяться больше чем на порядок при воздействии электрических полей напряженности $10^8 - 10^9$ В/м, и магнитных полей $10^4 - 10^5$ Тл на молекулу.

4) Синтезированы новые оптически активные молекулы, а также изучена их люминесценция. Эти молекулы имеют спироциклические заместители форма которых обуславливает поляризованное излучение, при этом, как флуоресценции, так и фосфоресценции. Фотофизические свойства данных молекул были детально изучены. А именно, показано, что основной канал тушения флуоресценции является интеркомбинационные конверсии $S1 \rightarrow T1$ и $S1 \rightarrow T2$, что приводит к заселению триплета $T1$, а далее наблюдаемой фосфоресценции молекулы.

5) Были созданы прототипы органических светоизлучающих устройств на основе данных молекул, что является непосредственной целью или главной научной задачей настоящего проекта. Такие устройства обладают способностью изменять энергию поляризованного излучения в широком диапазоне в зависимости от условий среды и способа возбуждения.