

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОКСАЛИНОВ И ХИНОКСАЛИНОНОВ. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ

Бурганов Т.И., Кацюба С.А., Исламова Л.Н., Фазлеева Г.М., Шарипова С.М., Калинин А.А.

*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН,
420088, ул. Академика Арбузова, дом 8, г. Казань, Россия
e-mail: timk90@mail.ru*

Одним из перспективных и активно развивающихся направлений современной науки о материалах является органическая электроника. Системы донорно-акцепторного строения (D-π-A) привлекают в ней особый интерес, выступая в качестве активных слоев материалов нелинейной оптики, органических светоизлучающих диодов, сенсоров разного типа, а также органических фотовольтаических элементов. D-π-A системы часто демонстрируют выраженную зависимость фотофизических свойств от структурной модификации и эффектов среды, которая была также продемонстрирована нами для производных хиноксалин(-нов/-нонов) [1, 2].

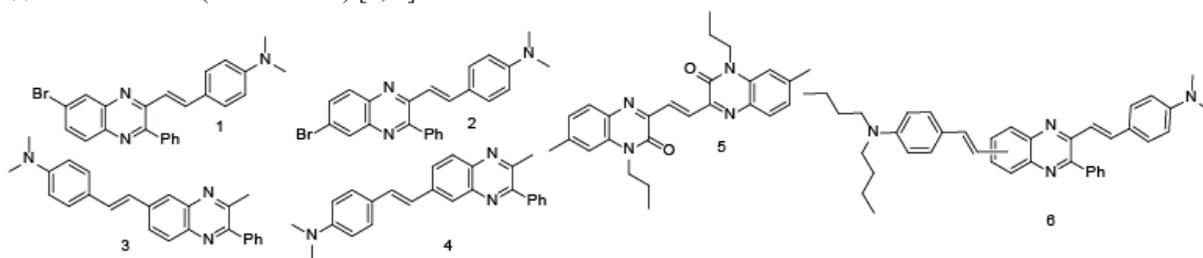


Рисунок 1. Структурные формулы рассмотренных систем.

В настоящей работе нами было проведено экспериментальное и теоретическое изучение ряда родственных систем (Рисунок 1), показана эффективность выбранной расчетной методики при интерпретации и предсказании электронных спектров и природы электронных переходов.

Литература

1. Burganov T.I., Katsyuba S.A., Sharipova S.M., Kalinin A.A., Monari A., Assfeld X., Physical Chemistry Chemical Physics, 2018, 20, 21515-21527.
2. Burganov T.I., Zhukova N.A., Mamedov V.A., Bannwarth C., Grimme S., Katsyuba S.A., Physical Chemistry Chemical Physics, 2017, 19, 6095-6104.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-73-00165)