

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ МЕЗОГЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III) В КАЧЕСТВЕ КОМПОНЕНТОВ ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Романова К.А.<sup>1</sup>, Галяметдинов Ю.Г.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Казанский национальный исследовательский технологический университет  
E-mail: ksenuya@mail.ru

## THEORETICAL SIMULATION OF THE EMISSION EFFICIENCY OF MESOGENIC EUROPIUM(III) COMPLEXES IN OPTOELECTRONIC MATERIALS

Romanova K.A.<sup>1</sup>, Galyametdinov Yu.G.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Kazan National Research Technological University

Relationships between liquid-crystalline properties, energies of the excited states, intramolecular energy transfer rates, and quantum yields of some mesogenic europium(III) complexes were studied. Their application with conductive conjugated polymers in optoelectronic materials was evaluated.

Мезогенные комплексы европия(III) (Eu(III)) с уникальным строением, отличительными жидкокристаллическими (ЖК), оптическими и магнитными свойствами выступают в роли компонентов перспективных функциональных материалов для оптоэлектроники и биомедицины [1]. Наличие неоднозначной взаимосвязи между их строением, структурой и свойствами, зависящими от различных факторов, осложняет практическое применение данных соединений. Вероятность заранее предугадать их оптические и ЖК свойства на стадии синтеза крайне невелика. В данной работе были выявлены теоретические подходы к созданию функциональных материалов на основе ряда мезогенных комплексов Eu(III) с  $\beta$ -дикетонами и основаниями Льюиса, а также некоторых проводящих полимеров. Изучены взаимосвязи между молекулярным строением, природой координационных полиэдров, параметрами полиэдров Вороного-Дирихле, эффективностью люминесценции и ЖК свойствами комплексов Eu(III). На основании рассчитанных энергий возбужденных состояний были определены основные каналы внутримолекулярного переноса энергии в комплексах Eu(III), рассчитаны скорости переноса энергии и значения квантового выхода люминесценции. Произведена оценка эффективности межмолекулярного переноса энергии в оптоэлектронных материалах на их основе и совместного применения с некоторыми проводящими полимерами. В ходе работы было установлено, что ЖК свойства мезогенных комплексов Eu(III) в основном определяются их лигандным окружением, магнитные свойства зависят от природы координационного полиэдра, на оптические свойства оказывают влияние оба этих фактора.

*Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютеров МВС-10П и МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН». Работа выполнена при финансовой поддержке проекта № ГСГК-0064/21. Проект реализуется победителем Конкурса на предоставление грантов преподавателям магистратуры благотворительной программы «Стипендиальная программа Владимира Потанина» Благотворительного фонда Владимира Потанина.*

1. K. A. Romanova, A. V. Kremleva and Yu. G. Galyametdinov, Int. J. Quantum Chem., V. 121, e26569 (2021).