#1

*Доброго дня. Представляю до Вашої уваги свою наукову роботу на тему:
Квантово-хімічне дослідження будови та електронно-спектральних властивостей електролюмінесцентного комплексу цинку з 8-(3,5-дифлуорофенілсульфаніламіно) хіноліном*

***На екрані ви бачите структурну формулу даного комплексу.
До його складу входять органічні N-вмісні органічні ліганди здатні випромінювати світло при дії електричного струму.***

#2

***Тому вони є перспективним матеріалом в створенні органічних світло випромінюючих діодів, які сьогодні використовують в новітніх технологіях таких як***:
*1.освітлення автомобіля
2.маркування спортивних майданчиків для різних видів спорту
3.створення гнучких екранів мобільних телефонів
4.телевізорів товщиною декілька міліметрів****За ствердженням експертів вже після 2020 року ОСВД проникнуть в усі технології освітлення, тому створення нових матеріалів для них є актуальним.***Таким новим матеріалом є нещодавно синтезований комплексом Zn(DFP-SAMQ)2, його вже всебічно досліджено : -УФ-;-ІЧ- спектроскопією, а також рентгеноструктурним аналізом.
Але теоретична інтерпретація отриманих результатів вимагає опрацювання

#3

*Тому метою даної роботи було:
Теоретично дослідити квантово-хімічну будову та електронно-спектральні властивості комплексу Zn(DFP-SAMQ)2.*

#4

*Такі дослідження дозволяють на орбітальному рівні пояснити механізм генерації світла в органічному діоді при дії електричного струму.
Така необхідність виникає при створенні нових матеріалів на основі даного, вже вивченого комплексу*

#5

Для досягнення мети поставлені наступні завдання:
*1. провести літературний огляд наукових джерел;
2. визначити оптимальну методику квантово-хімічного моделювання
3. провести розрахунки будови та електронних спектрів поглинання комплексу
4. провести інтерпретацію результатів квантово-хімічних розрахунків
5. запропонувати орбітальну схему поглинання світла комплексом Zn(DFP-SAMQ)2.*

#6

 *Наукова новизна полягає у тому, що у роботі вперше запропоновано екситонну модель випромінювання світла комплексом Zn(DFP-SAMQ)2 у твердій фазі
 Передбачається, що запропонована модель може бути поширена на аналогічні симетричні комплекси цинку з хіноліновими лігандами, що дозолить синтезувати нові електролюмінісцентні комплекси цинку для застосування їх у технології ОСВД.*

#7

***Що ж представляють собою ОСВД і який принцип їхньої роботи***.
Випромінювання світла відбувається в електролюмінісцентному шарі органічного напівпровідника.
При прикладанні різниці потенціалів утворюються електрони й дірки які мігрують один до одного і при рекомбінації в електролюмінісцентному шарі , утворюють екситон, який «гине»
В результаті чого випромінюється фотон.

#8

Для оптимізації геометрії комплексу Zn(DFP-SAMQ)2 використані методики
Теорія функціоналу густини та Нестаціонарна теорія функціоналу густини.
Розрахунки виконані за допомогою комп’ютерних пограм:
GAUSSIAN 03 AIMQB (AIMAll) SWizard 4.6

#9

***За допомогою яких були розраховані***1.Топологічні параметри:
співвідношення елементів кривизни електронної густини; значення Лапласіана та індексів делокалізації електронної густини;
2.Енергію, довжину координаційних зв’язків
3.Електронні спектри поглинання комплексу

#10

В результаті ми отримали наступну геометрію комплексу, яка сильно деформована в порівнянні з симетричним тетраедром. І передбачаємо , що чотири координаційні зв’язки Zn – N попарно рівноцінні.

#11

***Довести це можна за допомогою теоретичних розрахунків***

*Співвідношення елементів кривизни електронної густини в критичних точках менше 1 згідно квантової теорії Бейдера - це вказує на розрідження електронної густини в міжатомному просторі, що відповідає хімічним зв’язкам з низькою ковалентністю.*

#12

*У той же час, позитивне значення Лапсасіана електронної густини в критичних точках
І негативне значення густини електронної енергії Кремера-Крака
Відповідає хімічним зв’язкам з проміжним типом ковалентності.*

#13

*Величина індексів делокалізації відповідає середній ковалентності зв’язку*

**Отже зв’язки Zn – N є попарно рівноцінні з проміжним типом ковалентності**

#14

*Міра зосередження електронної густини між атомами визначає енергію взаємодії, яку можна розрахувати на підставі величини густини потенціальної енергії в критичних точках зв’язку за формулою Еспінози. Вона відповідає звязку середньої ковалентності.*

#15

***Щоб довести правильність наших розрахунків порівняємо їх з експериментальними даними отриманими за методом рентгеноструктурного аналізу (РСА)***

*Добре узгоджуються з експериментом
Довжини даних зв’язків Розподіл електронної густини
Лапласіан електронної густини Еліптичність*
Невисоке значення еліпничності для координаційних зв’язків Zn–N свідчить про динамічну стабільність п’ятичленних Zn-вмісних циклів.

#16

*Рівноважна структура комплексу додатково стабілізується за рахунок чотирьох водневих зв’язків
Розрахована енергія цих зв’язків вказує на незначну локалізацію електронної густини в міжатомному просторі – що характерне для слабких водневих зв’язків. Сумарна енергія стабілізації молекули комплексу за рахунок утворення даних зв’язків становить -8.48 ккал/моль.*

#17

***В електронному спектрі ми бачимо дві смуги поглинання***Перша широка смуга поглинання спостерігається як в теоретично розрахованому так і в експериментальному спектрі , проте меншої інтенсивності і з зсунутим максимумом

#18

*Дана смуга поглинання обумовлена двома синглет-синглетними електронними переходами з S0 в S1 і S2*

#19

*Перехід відбувається з вищої зайнятої молекулярної орбіталі (ВЗМО) на другий рівень незанятих вакантних молекулярних орбіта лей (НВМО)*Деякі орбіталі є попарно видовженими (мають приблизно однакову енергію) і тому переходи між ними є повністю змішаними.

#20

Друга смуга більш інтенсивна

#21

*Друга смуга поглинання обумовлена п’ятьма синглет-синглетними електронними переходами.
Найбільший внесок в інтенсивність смуги дають електронні переходи S0-S11 і S0-S15*

#22

Можна припустити, що електронні переходи призводять до формування екситонів Френкеля – квазічастинки, які утворюються при дії електричного струму на електроди ОСВД

#23

Під час роботи ми прийшли до таких висновків:

1. Координаційна сфера комплексу Zn(DFP-SAMQ)2 має квазітетраедричну будову.
2. Теоретичні дані добре узгоджуються з експериментальними.
3. Хілатні п’ятичленні Zn-вмісні цикли є динамічно стабільними, вони додатково стабілізується за рахунок чотирьох внутрішньомолекулярних водневих зв’язків.
4. Перша смуга поглинання в електронному спектрі комплексу Zn(DFP-SAMQ)2 обумовлена двома синглет-синглетними переходами. Друга смуга обумовлена 5-ма синглет-синглетними переходами. Обидва переходи відповідають за формування екситону Френкеля при

 фотозбудженні.

1. Тому, механізм генерації світла в ОСВД має виключно орбітальну природу.