Экспериментальное и теоретическое исследование циклометаллированных комплексов иридия(III) с бензимидазольными и дибензофеназиновыми лигандами для разработки красных люминофоров

***Мещерякова Е.А.1,2, Татарин С.В.2, Беззубов С.И.2***

*Студентка, 4 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

*2Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова, Москва, Россия*

*E-mail*: [*elizaveta.meshcheriakova@chemistry.msu.ru*](mailto:elizaveta.meshcheriakova@chemistry.msu.ru)

Циклометаллированные комплексы иридия(III), благодаря своей стабильности, оптическим свойствам и широкому потенциалу их модификации являются перспективными люминофорами, однако низкие квантовые выходы люминесценции в области длинноволновой эмиссии препятствуют их активному применению. Одной из причин снижения эффективности их люминесценции является значительный вклад безызлучательной внутримолекулярной колебательной релаксации. Для его уменьшения и повышения квантового выхода люминесценции в настоящей работе предложено использование дибензофеназинового каркаса в качестве жесткого полиароматического лигандного фрагмента.

В данной работе на базе незамещенного дибензофеназина синтезированы и структурно охарактеризованы *бис*-циклометаллированный хлоридный димер [Ir(dbpz)2Cl]2 и соответствующий гетеролептический комплекс иридия(III) [Ir(dbpz)2acac] с ацетилацетоном в качестве дополнительного лиганда. Показано, что димерный комплекс демонстрирует узкую (FWHM – 40 нм) и сравнительно интенсивную (квантовый выход в толуоле – 30%) фосфоресценцию при комнатной температуре, что нехарактерно для класса *бис*-циклометаллированных хлоридов.

Для объяснения феномена были применены квантово-химические расчеты: методом DFT получены оценки энергии граничных орбиталей, рассчитано распределение спиновой плотности в T1 состоянии. Была разработана методология для быстрого предсказания положения максимума люминесценции ЦМК иридия(III) различной природы: нейтральных, катионных, а также комплексов с пространственно разделенным положительным и отрицательным зарядом (цвиттер-ионы), которую в дальнейшем удастся применять в работе с большим объемом данных, например, с привлечением методов машинного обучения.

![Изображение выглядит как диаграмма, линия, График, снимок экрана

Автоматически созданное описание]()

Рис. 1. Дибензофеназин, экспериментальные спектры люминесценции для хлоридного димера [Ir(dbpz)2Cl]2 и гетеролептического комплекса [Ir(dbpz)2acac], визуализация распределения спиновой плотности в T1 состоянии для димера