

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Аддукты замещённых трис(β -дикетонатов) лантаноидов с основаниями Льюиса (2,2'-бипиридин, 1,10-фенантролин и их производные) в последнее время интенсивно исследуются, как компоненты люминесцентных нанокомпозитных материалов и устройств органической электроники: органических дисплеев, оптических усилителей, люминесцентных панелей. Перенос энергии возбуждения в этих соединениях на излучающий ион (эффект антенны) обеспечивают координированные ионом лантаноида органические лиганды. Жидкокристаллические (жк) аналоги аддуктов лантаноидов обладают повышенной эффективностью люминесценции благодаря способности образовывать упорядоченные, малодефектные среды с равномерным распределением иона лантаноида, которые могут ориентироваться внешними электрическими и магнитными полями. При этом информация о структуре мезогенных лантаноидов, крайне необходимая для предсказания их жк поведения и оценки магнитных и фотофизических характеристик, ограничена. Наличие в молекулах жк аддуктов лантаноидов большого числа длинноцепочечных алкильных заместителей затрудняет получение монокристалла для проведения рентгеноструктурного анализа. Поэтому поиск и использование адекватных квантово-химических методов моделирования структуры мезогенных аддуктов лантаноидов в настоящее время является важной и *актуальной* задачей.

Цель и задачи работы. Целью диссертационной работы являлось нахождение оптимального алгоритма расчёта строения и спектральных характеристик жк аддуктов трис(β -дикетонатов) лантаноидов. Для достижения поставленной цели в процессе работы решались следующие задачи:

- 1) подбор модельных соединений, являющихся структурными аналогами жк аддуктов лантаноидов, для которых имеются данные о строении;
- 2) расчёт структуры жк аддуктов трис(β -дикетонатов) лантаноидов с алкилзамещённым бипиридином; моделирование ИК-, ЯМР ^1H -, УФ-спектров этих комплексов квантово-химическими методами; оценка адекватности применённых методов для прогнозирования структуры и свойств лантанидомезогенов;
- 3) расчёт анизотропии геометрии молекул исследуемых соединений; установление влияния иона лантаноида и алкильного терминального заместителя в лигандах (β -дикетонах) на жк свойства комплексов;
- 4) оценка геометрии и молекулярного строения мезофаз, образуемых лантанидомезогенами, анализ оптических свойств их композитов с полимерами.