**Электронные свойства новых донорно-акцепторных диад на основе планарных и пирамидализованных полиенов**

***Кудинова Е.И.***

*Студентка, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: ekatkudinova@gmail.com*

Поиск органических соединений, демонстрирующих полупроводниковые свойства, является одним из актуальных направлений современных исследований по дизайну различных устройств органической электроники. Пирамидализованные (чашеобразные, геодезические) полиены – полициклические ненасыщенные углеводороды с непланарной структурой, углеродный каркас которых состоит из сочлененных шести- и пятичленных циклов. Особенности молекулярного и электронного строения этих соединений открывают перспективы создания органических оптоэлектронных устройств (диодов, солнечных батарей, полевых транзисторов) на их основе. Варьируя различные донорные и акцепторные заместители, можно добиваться необычных химических и электронных свойств, несвойственных другим полициклическим углеводородам, и получать новые органические и гибридные материалы с повышенными электроноакцепторными свойствами и электронной подвижностью.

Бромсодержащие производные бензо[ghi]флуорантена и диинденохризена были получены по четырёхстадийной методике и охарактеризованы методами ВЭЖХ-МС (ХИАД), масс-спектрометрии МАЛДИ и спектроскопии ЯМР 1H и 13С. Синтетическая схема подобрана таким образом, что формирование пятичленных циклов в каркасе геодезических полиенов происходит в ходе реакции твердофазного дегидрофторирования на поверхности -Al2O3. Оптимизирована методика предварительной обработки катализатора для количественной конверсии. Синтезированные бромпроизводные пирамидализованных полиенов были использованы в реакции Ульмана для получения донорно-акцепторных диад, в качестве донора был выбран карбазол. Также для сравнения была проведена аналогичная реакция с бромпиреном. Полученные донорно-акцепторные диады охарактеризованы методами ВЭЖХ-МС (ХИАД), масс-спектрометрии МАЛДИ и спектроскопии ЯМР 1H и 13С. Электронные и электрохимические свойства новых соединений исследованы методами флуоресцентной спектроскопии и циклической вольтамперометрии.
9-(Бензо[ghi]флуорантен-3-ил)-9H-карбазол демонстрирует высокие квантовые выходы и сольватохромизм. Для объяснения экспериментальных данных проведены квантово-химические расчеты методом TD-DFT.

 

Рис. 1. 9-(Бензо[ghi]флуорантен-3-ил)-9H-карбазол, 3,9-ди(9H-карбазол-9-ил)дииндено[4,3,2,1-cdef:4',3',2',1'-lmno]хризен и 9-(пирен-1-ил)-9H-карбазол