

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

_____ А.Д.Король

27 июня 2025 г.

Регистрационный № 3280/м.



ЭЛЕКТРО- И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СИСТЕМЫ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

7-06-0531-01 Химия

Профилизация: Химический дизайн новых материалов

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-06-0531-01-2023, учебного плана № М44-5.5-04/уч. от 29.12.2022.

СОСТАВИТЕЛИ:

Виталий Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент

РЕЦЕНЗЕНТ:

Ю.В. Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии БГУ
(протокол № 10 от 06.06.2025)

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий кафедрой

Д.В.Свиридов

Степанович-Работникова

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель дисциплины – ознакомить студентов магистратуры с основными классами органических веществ, способных к люминесценции при фото- и электровозбуждении, о механизмах возникновения и основных физических характеристиках люминесценции, а также с принципами проведения расчетов физико-химических свойств молекулярных люминофоров и излучателей OLED донорно-акцепторного типа.

Задачи дисциплины – сформировать у студентов представление о механизмах возникновения фото- и электролюминесценции в органических молекулах и комплексных соединениях, при помощи современных пакетов программ научиться проводить квантово-химические расчеты физико-химических свойств молекулярных люминофоров и излучателей OLED донорно-акцепторного, таких как: характеристики спектров поглощения и фотолюминесценции, разность энергий синглетных и триплетных возбужденных состояний, индексы переноса заряда.

Дисциплина состоит из двух частей. В первой части проводится классификация и рассматриваются механизмы возникновения фото- и электролюминесценции, а также принципы работы излучателей OLED различных поколений. Во второй части рассматриваются примеры использования современных пакетов программ для квантовохимических расчетов для решения ряда практических задач.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с углубленным высшим образованием.

Учебная дисциплина «Электро- и фотолюминесцентные системы» входит в модуль «Перспективные химические технологии и материалы» компонента учреждения образования.

Данная дисциплина связана с такими дисциплинами, как «Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия и строение молекул» и «Хемоинформатика» и может быть прочитана после изучения указанных дисциплин.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Электро- и фотолюминесцентные системы» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

Специализированные компетенции:

Использовать современные концепции строения материи, методы химического материаловедения, молекулярной инженерии для описания свойств функциональных материалов с различной структурной организацией;

Предлагать области применения новых материалов и технологий в химической и фармацевтической отрасли, в научной и инновационной деятельности.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- механизмы возникновения фото- и электролюминесценции в органических молекулах и комплексных соединениях, влияние структуры, растворителей, температуры на физические характеристики люминесценции;
- принципы синтеза фото- и электролюминофоров и конструирования на их основе фото- и электролюминесцентных устройств;
- современные квантовохимические методы моделирования строения и свойств молекул в основном и электронно-возбужденном состоянии;
- границы применимости, основные преимущества и недостатки различных квантовохимических методов расчета характеристик молекул в электронно-возбужденном состоянии;

уметь:

- интерпретировать механизмы возникновения фото- и электролюминесценции в органических молекулах;
- предсказывать изменение люминесцентных свойств конкретного соединения при изменении внешних условий (температура, растворитель, источник возбуждения)
- проводить расчеты характеристик спектров поглощения и фотолюминесценции и индексов переноса заряда методами квантовой химии;
- выполнять расчеты молекулярных дескрипторов;

иметь навыки:

- самостоятельного анализа спектров люминесценции разных классов органических соединений;
- проведения квантовохимических расчетов с использованием разнообразных современных методов.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 3 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Электро- и фотолюминесцентные системы» отведено для **очной формы** получения высшего образования – 90 часов, в том числе 36 аудиторных часа: лекции – 22 часа, практические занятия – 6 часов, семинарские занятия – 8 часов. **Из них:**

Лекции – 16 часов + 6 часов (ДОТ), семинарские занятия 8 часов, управляемая самостоятельная работа – 6 часов (ДОТ).

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Фотолюминесценция и органических молекул, и комплексных соединений

Тема 1.1. Электронные переходы в органических молекулах

Схема энергетических уровней органических люминофоров (диаграмма Яблонского). Соответствие электронных переходов линиям в спектре люминесценции. Молекулярная флуоресценция, фосфоресценция, замедленная флуоресценция. Запрещенные и разрешенные электронные переходы в комплексах металлов. Безызлучательные переходы: внутренняя конверсия и колебательная релаксация. Интеркомбинационная конверсия.

Тема 1.2. Зависимость люминесцентных свойств органических соединений от их структуры, условий возбуждения, температуры

Классификация органических люминофоров. Структурные особенности органических люминофоров. Влияние структуры молекулы, растворителя, примесей тяжелых атомов, температуры на люминесценцию органических молекул. Эффект Шпольского.

Тема 1.3. Собственная люминесценция биологических молекул

Собственная люминесценция биологических молекул. Люминесцирующие аминокислоты. Прямой и непрямой иммунофлуоресцентный анализ. Применение люминесцентных меток в иммунофлуоресцентном анализе.

Раздел 2. Органические электролюминесцентные системы

Тема 2.1. Органические светоизлучающие устройства

Понятие об органических электролюминесцентных системах (OLED). Структура и энергетическая диаграмма однослойного OLED. Принципы синтеза OLED. OLED на полимерах с системой сопряженных связей. Многослойные OLED: структура и энергетическая диаграмма. OLED на основе органических комплексов.

Тема 2.2. Излучатели, работающие по принципу термоактивируемой замедленной флуоресценции (TADF)

OLED на основе излучателей с термоактивируемой замедленной флуоресценцией (TADF). Преимущества и недостатки органических электролюминесцентных систем. Перспективы использования.

Раздел 3. Методы расчета молекул в электронно-возбужденном состоянии

Тема 3.1. Методы CI, MCSCF, CC и TD-DFT

Сравнительная характеристика методов конфигурационного взаимодействия (CI) и многоконфигурационного самосогласованного поля (MCSCF), метода связанных кластеров (CC) и теории функционала плотности для нестационарных состояний (TD-DFT).

Тема 3.2. Расчеты электронных спектров поглощения и фотолюминесценции с применением методов TD-DFT

Основные требования к функционалу электронной плотности и базисному набору при расчетах характеристик спектров поглощения и фотолюминесценции на примере расчета для производных бор-дипиррометена (BODIPY).

Тема 3.3. Расчеты и анализ ΔE_{ST} и индексов внутримолекулярного переноса заряда: f , $\Delta\mu$, S_{+-} и τ , для излучателей TADF

Принципы расчета для излучателей TADF разности энергии синглетного и триплетного возбужденных состояний (ΔE_{ST}) и индексов внутримолекулярного переноса заряда: силы осциллятора (f), изменения дипольного момента при переходе из основного в электронно-возбужденное состояние ($\Delta\mu$), степени перекрывания пространственных частей волновых функций основного и возбужденного состояний (S_{+-}) и степени разделения положительных и отрицательных частей электронной плотности основного и возбужденного состояний (τ).

Тема 3.4. Построение и анализ распределения электронной плотности МО и NTO. Методы учета влияния растворителя при расчетах спектров поглощения и фотолюминесценции

Построение и анализ распределения электронной плотности молекулярных орбиталей (МО) и натуральных орбиталей перехода (NTO). Континуумные модели растворителя. Теория самосогласованного реактивного поля (SCRF). Методы учета влияния растворителя при расчетах спектров поглощения и фотолюминесценции – схемы линейного отклика (LR) и специфических состояний (SS).

Тема 3.5. Основы молекулярного дизайна излучателей TADF

Основы молекулярного дизайна излучателей TADF

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Фотолюминесценция и органических молекул и комплексных соединений							
1.1	Электронные переходы в органических молекулах	2						
1.2	Зависимость люминесцентных свойств органических соединений от их структуры, условий возбуждения, температуры	2 (ДОТ)					2 (ДОТ)	Контрольная работа
1.3	Собственная люминесценция биологических молекул	2 (ДОТ)		2				Опрос
2.	Органические электролюминесцентные системы							
2.1	Органические светоизлучающие устройства	2 (ДОТ)						
2.2	Излучатели, работающие по принципу термоактивируемой замедленной флуоресценции (TADF)	2		2			2 (ДОТ)	Контрольная работа
3.	Методы расчета молекул в электронно-возбужденном состоянии							

3.1	Методы CI, MCSCF, CC и TD-DFT	2						Опрос
3.2	Расчеты электронных спектров поглощения и фотолюминесценции с применением методов TD-DFT	2						Опрос
3.3	Расчеты и анализ ΔE_{ST} и индексов внутримолекулярного переноса заряда: f , $\Delta\mu$, S_{+-} и τ , для излучателей TADF	2						Опрос
3.4	Построение и анализ распределения электронной плотности МО и NTO. Методы учета влияния растворителя при расчетах спектров поглощения и фотолюминесценции	4		2				Реферат
3.5	Основы молекулярного дизайна излучателей TADF	2		2			2 (ДОТ)	Контрольная работа
	Итого	22		8			6	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Колесова, Е. П. Оптическая спектроскопия и люминесценция многоатомных систем: учебно-методическое пособие / Е. П. Колесова, В. Г. Маслов, А. О. Орлова. – Санкт-Петербург : НИУ ИТМО, 2021. – 26 с.

Дополнительная литература

1. Матулис, В. Э. Прикладная квантовая химия : учеб. пособие для студ. хим. и физ. спец. учрежд., обеспеч. получение высшего образования / Вадим Э. Матулис, Виталий Э. Матулис, О. А. Ивашкевич. - Минск : БГУ, 2007. - 144 с.

2. Красовицкий, Б.М. Органические люминофоры / Б. М. Красовицкий, Б.М. Болотин - М.: Химия, 1984. - 336 с.

3. Matulis, Vitaly E.; Ragoyja, E. G.; Ivashkevich O. A. Accurate Theoretical Prediction of Optical Properties of BODIPY Dyes. Int. J. Quant. Chem. – 2020. – Vol. 120. – N. 9 – P. e26159.

4. Budevich, V. A.; Voitekhovich, S. V.; Zuraev, A. V.; Matulis, V. E.; Matulis, V. E.; Lyakhov, A. S.; Ivashkevich, L. S.; Ivashkevich, O. A. / Mesoionic tetrazolium-5-aminides: Synthesis, Molecular and Crystal Structures, UV-Vis Spectra, and DFT Calculations // Beilstein J. Org. Chem. – 2021. – Vol. 17. – P. 385-395.

5. Keruckiene R., Kusas N., Dvylys L., Skudis E., Matulis V.E., Ragoyja E.G., Lyakhov D.F., Klymenko I., Grazulevicius J.V. / Derivatives of Bis(trifluoromethyl)biphenyl and Various Donor Moieties Exhibiting Dual State Emission // J. Lumin. – 2022. Vol. – 241. – P. 118502–118512.

6. Masimukku N., Gudeika D., Volyniuk D., Bezvikonnyi O., Simokaitiene J., Matulis Vitaly, Lyakhov D., Azovskyi V., Gražulevičius J. V. / Bipolar 1,8-naphthalimides showing high electron mobility and red AIE-active TADF for OLED applications // Physical Chemistry Chemical Physics. 2022. – Vol. 24. – P. 5070-5082.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Для диагностики компетенций могут использоваться следующие средства текущей аттестации:

- выполнение тестовых заданий;
- письменные контрольные работы по отдельным темам;
- написание реферата.

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Электро- и фотолюминесцентные системы» учебным планом предусмотрен зачёт.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 1.2. Зависимость люминесцентных свойств органических соединений от их структуры, условий возбуждения, температуры (2 часа ДОТ)

Задание 1. Рассмотреть типы электронных переходов в органических молекулах.

Задание 2. Описать механизмы внутреннего и внешнего тушения люминесценции.

Задание 3. Рассмотреть влияние функциональных групп и заместителей на спектры поглощения и спектры люминесценции органических соединений.

Форма контроля – контрольная работа.

Тема 2.2. Излучатели, работающие по принципу термоактивируемой замедленной флуоресценции (TADF) (2 часа ДОТ)

Задание 1. Рассмотреть три типа излучателей светодиодов: светодиоды 1, 2 и 3 поколений. Указать их основные характеристики.

Задание 2. Рассмотреть принцип работы и основные требования к излучателям TADF.

Форма контроля – контрольная работа.

Тема 3.5. Основы молекулярного дизайна излучателей TADF (2 часа ДОТ)

Задание 1. Рассмотреть принципы расчета ΔE_{ST} и индексов внутримолекулярного переноса заряда: f , $\Delta\mu$, S_{+-} и τ , для излучателей TADF.

Задание 2. Рассмотреть методы учета влияния растворителя при расчетах спектров поглощения и фотолюминесценции.

Форма контроля – контрольная работа.

Примерная тематика семинарских занятий

Семинарское занятие № 1.

Расчеты спектра поглощения бензола в газовой фазе и растворе методом TD-DFT с использованием функционалов различных типов. (СДО)

Семинарское занятие № 2.

Анализ влияния природы заместителей на положение максимумов поглощения и испускания производных BODIPY. (СДО)

Семинарское занятие № 3.

Расчеты и анализ ΔE_{ST} и индексов внутримолекулярного переноса заряда: f , $\Delta\mu$, S_{+-} и τ , для излучателей OLED донорно-акцепторного типа.

Семинарское занятие № 4.

Построение и анализ распределения электронной плотности МО и НТО для излучателей OLED донорно-акцепторного типа. (СДО)

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется **эвристический подход**, который предполагает:

- демонстрацию многообразия решений профессиональных задач;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности.

При организации образовательного процесса **используются методы и приемы развития критического мышления**, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимания информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

- поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;
- выполнение домашнего задания;
- решение задач, предлагаемых на практических занятиях;
- подготовка к практическим семинарским занятиям;
- научно-исследовательские работы;
- составление моделей и проведение расчетов;
- подготовка и написание рефератов на заданные темы.

Учебно-программные материалы, примеры выполнения заданий, материалы для самостоятельного освоения учебного материала, список рекомендуемой литературы размещены в сетевом доступе на образовательном портале educhem.bsu.by.

Примерная тематика реферативных работ

1. Люминесцентный анализ: практическое применение
2. Люминесценция биологических объектов
3. Хемилюминесценция: закономерности, механизмы, примеры реакций
4. Наноалмазы: причины и механизмы люминесценции, перспективы применения
5. Способы учета электронной корреляции
6. Методы функционала электронной плотности для нестационарных состояний
9. Методы конфигурационного и мультikonфигурационного взаимодействия

10. Теория связанных кластеров
11. Биомаркерные люминофоры и молекулярные антенны на основе BODIPY
12. Фотохимические реакции

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Схема энергетических уровней органических люминофоров (диаграмма Яблонского).
2. Молекулярная флуоресценция, фосфоресценция, замедленная флуоресценция. Запрещенные и разрешенные электронные переходы в комплексах металлов.
3. Безызлучательные переходы: внутренняя конверсия и колебательная релаксация. Интеркомбинационная конверсия. Классификация органических люминофоров.
4. Прямой и непрямой иммунофлуоресцентный анализ. Применение люминесцентных меток в иммунофлуоресцентном анализе.
5. Органических электролюминесцентные системы (OLED).
6. Принципы синтеза OLED.
7. Структура и энергетическая диаграмма однослойного OLED.
8. Принципы работы OLED 1, 2 и 3 поколений.
9. Особенности структуры излучателей OLED с термоактивируемой замедленной флуоресценцией (TADF)
10. Преимущества и недостатки органических электролюминесцентных систем. Перспективы использования
11. Сравнительная характеристика методов CIMCSCF, CC и TD-DFT.
12. Характеристика базисных наборов
13. Основные требования к функционалу электронной плотности и базисному набору при расчетах характеристик спектров поглощения и фотолюминесценции
14. Методы расчета для излучателей TADF ΔE_{ST} и индексов внутримолекулярного переноса заряда. Корреляция указанных величин
15. Построение и анализ распределения электронной плотности молекулярных орбиталей (MO) и натуральных орбиталей перехода (NTO).
16. Теория самосогласованного реактивного поля (SCRFF). Методы учета влияния растворителя при расчетах спектров поглощения и фотолюминесценции
17. Методы расчета электронных спектров поглощения и фотолюминесценции
18. Основы молекулярного дизайна излучателей TADF
19. Особенности строения излучателей MR-TADF
20. Расчеты энергии спин-орбитального взаимодействия

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Учебная дисциплина не требует согласования			

Заведующий кафедрой неорганической химии
член-корреспондент НАН Беларуси
доктор химических наук, профессор



Д.В.Свиридов

06.06.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
