
Photophysique de chromophores organiques en solution : confronter expérience et calculs TD-DFT

Steeve Laroussi*¹, Claudine Katan^{†1}, and Karine Costuas^{‡1}

¹Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR) – Institut National des Sciences Appliquées (INSA) – Rennes, Université de Rennes 1, CNRS : UMR6226, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes, Institut National des Sciences Appliquées [INSA], Institut National des Sciences Appliquées [INSA] – Campus de Beaulieu - Bât. 10 Avenue du Général Leclerc 35042 Rennes Cedex, France

Résumé

Les dérivés de la triphénylamine intéressent la communauté scientifique pour leurs applications dans différents domaines, comme l'électronique moléculaire ou la bio-imagerie à deux photons.¹ Ces composés sont souvent fluorescents, et l'introduction de groupements accepteurs permet de moduler la longueur d'onde et l'intensité de fluorescence.² Dans cette affiche, nous discutons de la nature de l'absorption et de l'émission des dérivés présentés sur le schéma ci-dessous. Pour ce faire, différents calculs DFT et TD-DFT ont été réalisés avec des fonctionnelles hybrides globales et hybrides corrigées longues portées. Afin de se rapprocher des conditions expérimentales, tout en limitant le coût de calcul, le modèle de solvant implicite PCM a été utilisé. De plus la confrontation des différents niveaux de théorie avec l'expérience permet de valider la méthode de calcul utilisée et de mettre en évidence l'importance du bonne prise en compte du solvant pour ce type d'étude. L'analyse de ces résultats permet une compréhension fine des phénomènes de fluorescences des dérivés de la triphénylamine. Les calculs mettent notamment en évidence une différence de géométrie importante entre les états fondamentaux et excités de ces différents dérivés. Ces changements de géométries jouent un rôle clés dans la compréhension de la luminescence de ces composés.

Mots-Clés: DFT, TD, DFT, Triphénylamine, PCM

*Intervenant

[†]Auteur correspondant: claudine.katan@univ-rennes1.fr

[‡]Auteur correspondant: karine.costuas@univ-rennes1.fr