

Prédictions *ab initio* du rendement quantique d'émission de fluorophores organiques

Denis Jacquemin,^{1,2,*}

¹ Université de Nantes, CEISAM UMR 6230, CNRS, Nantes F-44000, France

² Institut Universitaire de France, Paris F-75005, France

* Denis.Jacquemin@univ-nantes.fr

Cette présentation porte sur la prédition du rendement quantique de fluorescence de chromophores organiques à l'aide d'approches théoriques. Après avoir passé rapidement en revue les différentes stratégies calculatoires disponibles, nous détaillerons l'approche statique qui repose sur la modélisation fine des interactions existantes entre les configurations électroniques clés qui interviennent dans les processus de désexcitations (voir figure 1). En appliquant la règle d'or de Fermi, il est possible d'évaluer les couplages vibroniques entre deux états adiabatiques afin de calculer les constantes radiatives (k_r) et non-radiatives (k_{rc}). Il convient ensuite d'introduire les autres phénomènes non-radiatifs en fonction du composé considéré. Pour une série de fluorophores basés sur un cœur naphthalimide,^[1] nous montrerons que la théorie reproduit avec précision les tendances expérimentales de rendement quantique de fluorescence en utilisant, d'une part, l'approche vibronique pour évaluer ces constantes et, d'autre part, des modèles cinétiques pour les autres processus compétitifs tels que le transfert de charge intramoléculaire (TICT), le croisement inter-système (ISC) ou le transfert d'électron photoinduit (PeT). D'autres séries de chromophores organiques seront également évoquées,^[2-3] avec leurs succès...et leurs échecs! Ainsi l'utilité et les limites de l'approche utilisée dans un cadre appliqué seront précisées au terme de cette présentation.

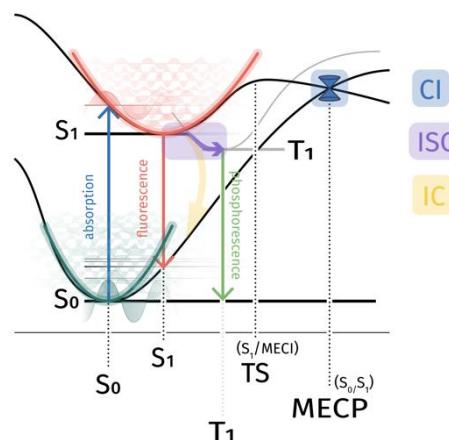


Figure 1 : Diagramme de Perrin-Jablonski des processus photophysiques à considérer dans une approche statique

Références (Calibri, 11 pts, alignement à gauche)

- [1] M. Krzeszewski, *et al.*, *Org. Lett.*, accepté pour publication
- [2] J. S. A. Badaro *et al.*, *Org. Chem. Front.* **9** (2022) 1861-1874.
- [3] K. V. Vygranenko *et al.*, *Chem. Commun.* **58** (2022) 1542-1545.