Tesi doctoral presentada per

**Claudia Climent Biescas**

per optar al títol de Doctor per la Universitat de Barcelona


Programa de Doctorat en Nanociències


# Theoretical study of excited states in molecules and molecular aggregates relevant for optoelectronic applications


Dirigida per:

## Dr. David Casanova Casas

(Euskal Herriko Unibertsitatea, Donostia International Physics Center)


## Dr. Pere Alemany Cahner

(Universitat de Barcelona)


Tutor:

## Dr. Pere Alemany Cahner

(Universitat de Barcelona)


Departament de Ciència dels Materials i Química Física

Institut de Química Teòrica i Computacional

Facultat de Química

Universitat de Barcelona


Barcelona, abril 2017

Als meus pares, i a la iaia Teresa

# CONTENTS

# Chapter 2: Phosphorescent Ir(III) complexes and their aggregation induced emission     107

# Chapter 3: Photophysics of covalently bridged naphthalene dimers     227