

Poszukiwania nowych cząsteczek organicznych z inwersją tryplet-singlet w stanie wzbudzonym metodami teoretycznymi

mgr Magdalena Duszka

Instytut Fizyki, Polska Akademia Nauk

Odkrycie niezawierających metali chromoforów organicznych, które mogą pełnić rolę efektywnych emiterów w organicznych diodach elektroluminescencyjnych (OLED), zrewolucjonizowało w ostatnich latach naukę o materiałach do urządzeń optoelektronicznych. W emiterach OLED najniższe stany wzbudzone, singletowy (S_1) i trypletowy (T_1), obsadzone są przez rekombinację wstrzykiwanych elektronów i dziur w stosunku 1:3, zgodnie ze statystyką spinową. Duże obsadzenie stanu T_1 jest niekorzystne dla uzyskania wysokiej wydajności kwantowej fluorescencji. Powszechnym rozwiązaniem jest projektowanie związków o odpowiednio małej, dodatniej przerwie energetycznej S_1 - T_1 , umożliwiającej odwrotne przejście międzysystemowe (RISC) w temperaturze pokojowej. W procesie tym stan S_1 obsadzany jest ze stanu T_1 , co jest obserwowane w materiałach wykazujących aktywowaną termicznie opóźnioną fluorescencję (TADF). Ostatnie badania wykazały, że niektóre organiczne cząsteczki zamkniętopowłokowe zawierające atomy azotu i boru łamią regułę Hunda, wykazując odwrócenie kolejności stanów S_1 i T_1 (IST). To odwrócenie poziomów energetycznych umożliwia efektywniejszą niż w typowych materiałach TADF konwersję z trypletu do singletu. Za pomocą obliczeń teoretycznych podejmujemy próbę znalezienia nowych cząsteczek IST oraz uzyskania głębszego wglądu w ich właściwości elektronowe. Naszym celem jest przyspieszenie procesu wdrożenia tych cząsteczek w technologię wytwarzania nowej generacji OLED.