

Łamiące Regułę Hunda Częsteczki jako Prekursory Nowych Materiałów Optoelektronicznych

Organiczne diody luminescencyjne (ang. organic light emitting diodes – OLED) są przedmiotem znacznego zainteresowania zarówno ze strony badaczy jak i przemysłu z powodu ich bezprecedensowych zastosowań w wyświetlaczach i technologiach oświetleniowych. OLEDy posiadają cały szereg zalet w stosunku do tradycyjnych wyświetlaczy ciekłokrystalicznych, takie jak lepsza jakość obrazu, lekkość, szybka reakcja, szeroki kąt widzenia, cienkość i szeroka gama emitowanych kolorów na skutek różnorodności materiałów organicznych. Ich istotną zaletą z punktu widzenia zastosowań jest również możliwość konstrukcji OLED na elastycznych podłożach. Natomiast główną słabością materiałów organicznych jest stosunkowo niska wydajność świecenia.

Przyczyna tego wiąże się z tzw. Regułą Hunda, zgodnie z którą w materiałach organicznych (nieświecący) tripletowy stan wzbudzony leży energetycznie poniżej (świecącego) wzbudzonego stanu singletowego. Zgodnie ze statystyką spinową, rekombinacja nośników ładunku wygenerowanych przez napięcie w materiale optoelektronicznym produkuje ekscytony singletowe i tripletowe w stosunku 1:3, tak więc wydajność kwantowa luminescencji w takich materiałach nie może nominalnie przekroczyć 25%. Idealny materiał organiczny do zbudowania diody luminescencyjnej powinien więc posiadać wysoce emisyjny stan singletowy leżący poniżej stanu tripletowego. Niestety, do niedawna, nie była znana żadna stabilna cząsteczka organiczna łamiąca Regułę Hunda. Pierwsza stabilna cząsteczka tego typu odkryta przez wnioskodawcę i współpracowników w roku 2019 stanowi przełom dla konstrukcji nowej klasy optoelektrycznych materiałów organicznych i pozwala w zasadzie na uzyskanie 100% wydajności w konwersji elektronów na fotony w diodach luminescencyjnych.

Głównym celem tego projektu jest przeprowadzenie obszernych eksploracji obliczeniowych nowej klasy układów molekularnych wykazujących inwersję singlet-triplet w celu zrozumienia podstawowych mechanizmów determinujących to zjawisko oraz wyznaczenie czynników elektronowych i jądrowych, które za to są odpowiedzialne. Zakładając, że tego typu cząsteczki posiadające znaczną wydajność luminescencji zostaną w ramach tego projektu wynalezione, stanowiąc będą podstawą dla konstrukcji kolejnej (czwartej) generacji OLED.