

Działalność ludzi zmienia naszą planetę i zmiany te zachodzą co raz szybciej. Jest szansa, że w ciągu kilkudziesięciu lat ze względu na dominującą kulturę „użyć i wyrzucić” wraz z szybkim rozwojem technologii, rosnącą liczbą „jednosezonowych” urządzeń elektronicznych, tonami zużytych baterii itd., problem utylizacji odpadów stanie się niezwykle istotny. Wysoce kosztowne i skomplikowane technologicznie procedury utylizacji są zwykle spowodowane użyciem materiałów nieorganicznych, głównie zawierających toksyczne metale ciężkie. Z drugiej strony, materiały organiczne oferują wiele korzyści, a przede wszystkim niski koszt produkcji i utylizacji, szeroką dostępność, niską toksyczność i biokompatybilność. Im szybciej nieorganiczne materiały zawierające metale ciężkie zostaną zastąpione organicznymi, tym lepiej.

Technologia organicznych diod elektroluminescencyjnych (*angl.* OLED) stanowi jeden z najbardziej fascynujących i obiecujących przykładów zastosowania materiałów organicznych w elektronice. Pomimo nazwy „organiczne”, kluczowe elementy dostępnych na rynku diod OLED nadal zawierają emiter z metalem ciężkim. Ten projekt jest zorientowany na badaniach zjawiska termicznie aktywowanej opóźnionej fluorescencji (*angl.* TADF), którego zastosowanie w diodach OLED jest najbardziej obiecującym sposobem zastąpienia emiterów z metalami ciężkimi przez całkowicie organiczne. Zjawisko TADF umożliwia wydajną transformację „nieświecących” ekscytonów trypletowych w singletowe (proces spin-flip), które wytwarzają światło. Obecnie istnieją dwa fundamentalne problemy, które utrudniają dalszy rozwój diod TADF OLED: niska stabilność i wydajność diod o barwie ciemnoniebieskiej oraz brak uniwersalnego modelu opisującego kluczowe parametry organicznych emiterów TADF. Problemy te są ze sobą ściśle powiązane: bez jasnego zrozumienia zjawiska trudno jest znaleźć najlepsze rozwiązanie dla jego zastosowania.

Pomimo dużego zainteresowania naukowców zjawiskiem TADF, opracowane wcześniej modele fotofizyczne opisują tylko wybrane parametry pojedynczych emiterów w bardzo ograniczonych warunkach. Niestety obecne zasady projektowania molekularnego w dużym stopniu zależą od takich modeli. Wszystkie one kierują się znaną od prawie stu lat regułą wyboru, zgodnie z którą przejścia między stanami elektronowymi o tej samej naturze, ale różnym spinie są zabronione (przejścia spin-flip). W rzeczywistości oznacza to, że takie przejścia trwają milisekundy lub nawet sekundy, co jest czasem zbyt długim dla zastosowań w OLED.

Dokładna analiza literatury i nasze wstępne badania jednego z najpopularniejszych emiterów TADF dowodzą, że poprzednie modele są mylne. Zbadany związek nie tylko łamie spinową regułę wyboru, ale wspomniane powyżej przejścia spin-flip także zachodzą w nim około milion razy szybciej niż oczekiwano! Wniosek ten jest zaskakujący i musimy sprawdzić, czy można go uogólnić dla innych związków. Aby ulepszyć „całkowicie organiczną” technologię OLED i zrobić krok do rozwiązania problemu ciemnoniebieskich OLED, powinniśmy najpierw zrozumieć, czy inne najlepsze niebieskie emitery TADF również łamią spinową regułę wyboru. Za pomocą badań eksperymentalnych i teoretycznych w różnych warunkach i temperaturach zostanie zrealizowany pierwszy cel tego projektu: opracowanie uniwersalnego modelu, opisującego kluczowe parametry najlepszych emiterów TADF, a na jego podstawie przeanalizowanie możliwości stworzenia idealnego emitera.

Niezależnie od tego czy są zabronione lub nie, korzystne przejścia spin-flip powinny być przyspieszone, zwłaszcza w niebieskich emiterach. Z tego powodu kolejnym celem tego projektu jest zbadanie wpływu tanich i dostępnych nietoksycznych ciężkich atomów na ciemnoniebieskie organiczne emitery TADF. Realizacja drugiego celu jest poszukiwaniem złotego środka pomiędzy całkowicie organicznymi materiałami a materiałami zawierającymi ciężkie metale, aby rozwiązać problem niebieskich diod OLED. W tym celu do najlepszych emiterów TADF zostaną wprowadzone tanie i dostępne ciężkie halogeny i tlenowce. Badania takich hybrydowych emiterów mają odpowiedzieć na następujące pytania: jak obecność ciężkich atomów wpływa na korzystne przejścia spin-flip? Jakie elementy i w jaki sposób można wykorzystać do ulepszenia niebieskich emiterów? Jakie negatywne czynniki towarzyszą wprowadzeniu ciężkich atomów?

Realizacja obu celów jest ściśle powiązana. Uniwersalny model TADF umożliwi lepsze zrozumienie badanych procesów, a jego zastosowanie do emiterów zawierających tanie ciężkie atomy pomoże zweryfikować model i być może znaleźć drogę do udoskonalenia technologii OLED.

Plan projektu obejmuje badania przy użyciu nowoczesnych metod chemii organicznej, stacjonarnych i czasowo-rozdzielczych spektroskopii elektronicznych oraz obliczeń kwantowo-chemicznych.