

1. Cel prowadzonych badań/hipoteza badawcza w języku polskim

Ten 24-miesięczny projekt ma na celu otrzymanie czysto organicznych emiterów TADF w celu stworzenia wysokowydajnych niebieskich urządzeń TADF-OLED. TADF oferuje ogromną poprawę wydajności i jasności fluorescencyjnych diod OLED. Fluorescencja obserwowana z singletowego stanu wzbudzonego TADF skutkuje szerokim widmem emisyjnym, co stanowi przeszkodę w zastosowaniach w wyświetlaczach, gdzie wymagana jest wysoka czystość koloru. Aby rozwiązać ten problem, zaprojektowano makrocykle TADF oparte na wielokrotnym rezonansie (MR). Mądra strategia projektowania wydajnych związków TADF jest bardzo pożądana. W pierwszym etapie niniejszego projektu zostanie przeprowadzona synteza, która będzie oparta na najlepszych wynikach teoretycznych badań kwantowo-chemicznych. Zsyntetyzowany makrocykl zostanie w pełni scharakteryzowany oraz przeprowadzone zostaną szczegółowe badania fotofizyczne. Ostatnim etapem będzie wytworzenie i pełna charakterystyka niebieskiej diody MR-TADF-OLED.

2. Zastosowana metoda badawcza/metodyka w języku polskim

Doskonałe zrozumienie zależności pomiędzy strukturą molekularną a właściwościami jest kluczowe i stanowi ważne narzędzie do projektowania wysokowydajnych organicznych urządzeń elektronicznych.

Niniejsza propozycja badawcza będzie podzielona na następujące główne zadania:

i) Zaprojektowanie i teoretyczne badania kwantowo-chemiczne nowego niebieskiego TADF przy użyciu oprogramowania Schrödingera, poprzez obliczenia DFT. Symulacja rozkładu HOMOs i LUMOs oraz przewidywanie wzbudzonych poziomów energetycznych;

ii) Synteza ambipolarnych makrocykli wyprowadzonych z akceptora chinolino[3,2,1-de]akrydino-5,9-dionu oraz z donorów 4,4,8,8,12,12-heksametylo-8,12-dihydro-4H-benzo[9,1]chinolizino[3,4,5,6,7-defg]akrydiny i difenylaminy.

iii) Pełna charakterystyka docelowych TADF z wykorzystaniem spektroskopii NMR, spektrometrii mas wysokiej rozdzielczości (HRMS) i analizy termogravimetrycznej (TGA) oraz krystalografii rentgenowskiej;

iv) Badania elektrochemiczne i spektroelektrochemiczne przy użyciu UV-Vis-NIR, EPR, Ramana i fluorescencji, w celu zbadania zmian strukturalnych badanych cząsteczek. Wartości energii elektrochemicznej, takie jak luka pasmowa i poziomy HOMO-LUMO zostaną uzyskane z analizy woltamperometrii cyklicznej (CV) w celu wybrania emiterów o potencjalnym zastosowaniu w urządzeniach OLED;

v) Badania fotofizyczne, takie jak wpływ tlenu na intensywność fluorescencji, solwatochromizm fluorescencji, widma czasowo-rozdzielcze, zależność mocy od opóźnionej fluorescencji i zanik fluorescencji, w celu zrozumienia zależności struktura-właściwości parametrów TADF;

vi) Wytworzenie i charakterystyka niebieskich przyrządów MR-TADF-OLED w kierunku wysokich EQE i wąskiej fluorescencji;

3. Wpływ spodziewanych rezultatów na rozwój nauki, cywilizacji, społeczeństwa w języku polski

Obecnie oświetlenie zużywa ponad 15% całkowitej energii elektrycznej na świecie, będąc odpowiedzialnym za 5% światowej emisji gazów cieplarnianych. Urządzenia OLED są najbardziej przyjazną dla środowiska formą oświetlenia na naszej planecie; są one przetwornikami energii elektrycznej na konwersję światła. Elastyczne urządzenia OLED są wielką obietnicą zrewolucjonizowania przemysłu oświetleniowego. Dlatego też niniejszy projekt odpowiada Programowi Działań Środowiskowych UE do roku 2020, gdzie jednym z trzech kluczowych celów jest przekształcenie Unii w zasobooszczędną, ekologiczną i konkurencyjną gospodarkę niskoemisyjną. Priorytetowe trendy naukowe określone w Założeniach polityki naukowej, naukowo-technicznej i innowacyjnej państwa do roku 2020 - "Założenia polityki naukowej, naukowo-technicznej i innowacyjnej państwa do 2020 r." - dokumentu, lokując się w takich grupach tematycznych jak *Info: optoelektronika*, *Techno: nowe materiały i technologie* oraz *Basics: chemia jak też i fizyka ciała stałego*.

Upowszechnianie uzyskanych wyników odbywać się będzie poprzez publikacje w czasopismach naukowych o zasięgu światowym, z ukierunkowaniem na czasopisma o wysokim współczynniku wpływu. Wyniki badań będą również prezentowane na konferencjach krajowych i międzynarodowych.