



*Ambipolarne związki poliaromatyczne w kształcie misy, zawierające precyzyjnie zlokalizowane domieszki atomów azotu. Unikatowa klasa wysoce wydajnych emiterów OLED.*

Marcin Lindner

**Motywacja:** Wykorzystanie modyfikowanych strukturalnie policyklicznych węglowodorów aromatycznych (PAHs) o niepłaskiej strukturze misy, zawierających heteroatomy precyzyjnie wbudowane wewnątrz szkieletu organicznego, pozwala na ścisłą kontrolę ich właściwości fizykochemicznych. Najczęściej prezentowane, zawierające w swej strukturze jeden atom azotu, są bogatymi w elektrony półprzewodnikami typu p. Niemniej ich budowa nie pozwala na dalsze syntetyczne dostrojenie właściwości optycznych, co jest niezbędne dla potencjalnego zastosowania jako nowych emiterów OLED trzeciej generacji. W ciągu ostatnich dwóch lat wprowadzono nową koncepcję multirezonansowych emiterów OLED opartych na płaskich strukturach organicznych zawierających symetrycznie ułożone atomy azotu w pozycjach 1,3/1,4. O ile są one dobrymi emiterami światła niebieskiego, o tyle ze względu na niską dostępność potencjalnych bloków budulcowych oraz konieczność obsadzenia peryferii cząsteczek jednostkami zapobiegającymi ich agregacji, nie ma możliwości wprowadzenia jednostek wpływających na skrócenie luki energetycznej HOMO-LUMO, odpowiedzialnej za barwę emisji. Wprowadzenie możliwości multi-rezonansowej odpowiedzi do niepłaskich szkieletów typu misy pozwoli na maksymalne wykorzystanie zalet płynących zarówno z zaburzenia planarności (TADF, zwiększenie rozpuszczalności) jak i z multi-rezonansu (zwiększenie wydajności emisji).

**Cel badań:** Celem niniejszego projektu realizowanego przez **pierwsze polskie konsorcjum optoelektroniki organicznej** jest wspomaganą komputerowo synteza nowych, wysoce symetrycznych barwników opartych na (i) 1,4/1,3/1,2-diazotowych cząsteczkach w kształcie misy zawierających w swej strukturze, w pełni sprzężone fragmenty (ii) ubogie w elektrony. Implementacja takiej topologii (i) pozwoli na unikanie nakładania się orbitali HOMO-LUMO, co jest kluczowe dla osiągnięcia emisji TADF w urządzeniach OLED. Co więcej, zaproponowana strukturyzacja pozwala na dostosowanie charakteru elektronowego, nie tylko w pełni sprzężonej jednostki ubogiej w elektrony (a), ale daje po raz pierwszy możliwość wprowadzenia dodatkowych grup bogatych w elektrony (b), tak by przy wykorzystaniu obu czynników strukturalnych (a/b) nie tylko swobodnie dostrajać zakres emisji, ale ulepszać jednocześnie wszystkie właściwości optoelektroniczne (tj. wydajność kwantową fluorescencji-PLQY, zewnętrzną wydajność kwantową emisji -EQE, szerokość pasma emisji). Projekt realizowany w ramach naszego konsorcjum będzie działał zgodnie z podejściem stopniowym między różnymi sekcjami, w tym wspomaganym komputerowo projektowaniem molekularnym, pozwalającym na wstępną optymalizację geometrii i właściwości elektronowych proponowanych barwników (kierownik: Prof. A. Kubas). Równolegle do badań teoretycznych rozpoczniemy prace syntetyczne, stanowiące trzon tego projektu obejmujące preparatykę związków: o różnym stopniu wielkości misy, umiejscowieniu rezonansowych atomów azotu, regioizomerycznym umieszczeniu podstawników ubogich w elektrony, umiejscowieniu jednostek bogatych w elektrony (kierownik: Dr M. Lindner). Kolejno, przeprowadzimy badania fotofizyczne otrzymanych barwników docelowych w roztworze i stanie stałym, które zostaną wykorzystane jako warstwy emisyjne w urządzeniach MR TADF OLED (kierownik: Prof. P. Data).

**Oczekiwany wpływ projektu badawczego:** Proponowana strategia racjonalnego dostrajania struktury elektronowej organicznych architektur w kształcie misy jest atrakcyjna zarówno z punktu widzenia badań podstawowych, jak i stosowanych. Dzieje się tak, ponieważ strukturalnie estetyczne barwniki organiczne z precyzyjnie ułożonymi, rezonansowymi atomami azotu i odpowiednio zaimplementowanymi podjednostkami ubogimi w elektrony mogą być oferowane jako nowe wysoce wydajne warstwy emisyjne w diodach OLED, co powinno spowodować nagły przełom w relatywnie nowym gatunku emiterów multirezonansowych. Proponowane badania obejmują również aspekt zrównoważonego gospodarowania i oszczędzania energii poprzez wykorzystanie źródeł alternatywnych do materiałów dostępnych na rynku. Potencjalne zastąpienie emiterów zawierających nieprzyjazne dla środowiska kompleksy metali, przez bezpieczniejsze emitory organiczne, pozwoli na spełnienie warunków „Europejskiego Zielonego Ładu”, który został udostępniony opinii publicznej przez Komisję Europejską i stanowi jeden z naczelných kierunków rozwoju wspólnoty europejskiej.