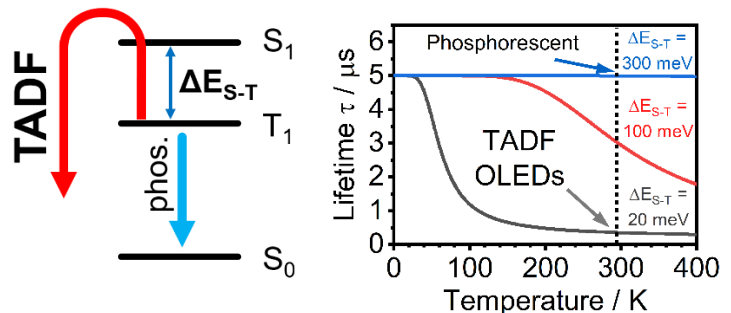


Odkrywanie wciąż istniejących tajemnic związków irydu

Luminescencyjne związki irydu odgrywają ważną rolę w nowoczesnej technologii wyświetlaczy. Wszystkie smartfony lub telewizory z wyższej półki z wyświetlaczami opartymi na technologii OLED będą zawierały związki na bazie irydu w warstwie urządzenia wytwarzającej światło. Oprócz zastosowania w OLED światła widzialnego, odgrywają one ważną rolę w oświetleniu w bliskiej podczerwieni, które znajduje zastosowanie w technologiach noktowizyjnych. Mają one też znaczenie w innych dziedzinach nauki: mogą być stosowane jako fotokatalizatory – związki wspomagające reakcje chemiczne w obecności światła, a także barwników bioobrazowych – pozwalających na wykonywanie migawek żywych komórek i tkanek. Od wielu lat badamy luminescencyjne związki irydu i naukowcy uważają, że już je w pełni zrozumieli. A przynajmniej tak myśleli! Uważa się, że związki irydu emitują poprzez dłużej żyjące, tak zwane stany trypletowe, powodując fosforescencję. Celem tego projektu jest zbadanie nowego mechanizmu luminescencyjnego, dzięki któremu kompleksy irydu mogą emitować światło. Główny badacz (PI) tego projektu zamierza zademonstrować nie tylko sposoby aktywacji tego nowego mechanizmu, ale także zidentyfikować związki irydu, w których naukowcy go przeoczyli!

Nowy mechanizm związany jest z właściwościami tzw. stanów wzbudzonych molekuł – stanów, które pojawiają się po uzyskaniu przez molekułę energii poprzez absorpcję światła lub wzbudzenie elektryczne. Cząsteczka zamiast wracać do stanu początkowego (podstawowego) dolną (i wolniejszą!) ścieżką poprzez fosforescencję ze stanu trypletowego (T_1), przechodzi przez stan górny singletowy (S_1) i szybciej powraca do stanu podstawowego, poprzez fluorescencję. Ten rewolucyjny mechanizm nazywa się termicznie aktywowaną opóźnioną fluorescencją (TADF) i jest przedstawiony na **Rys. 1**. Różnica energii pomiędzy S_1 i T_1 , ΔE_{S-T} jest zwykle wyrażana w fizycznych jednostkach energii – elektronowoltach (eV). Typowe wartości dla barwników fluorescencyjnych TADF wynoszą poniżej 200 milielektronowoltów (meV).



Rysunek 1. (po lewej) Schematyczne przedstawienie mechanizmu TADF; (po prawej) przykład tego, jak TADF skraca czas życia stanu wzbudzonego emitera metaloorganicznego z jego naturalnej szybkości fosforescencji 5 mikrosekund do 500 nanosekund w temperaturze pokojowej przy $\Delta E_{S-T} = 20$ meV.

Jednym ze sposobów, w jaki naukowcy mierzą szybkość, z jaką zachodzą takie przejścia od stanu wzbudzonego do stanu podstawowego, jest czas życia stanu wzbudzonego, który jest określany w sekundach. Na przykład typowe związki irydu wykazują czas życia fosforescencji wynoszący 1-10 mikrosekund. Zaproponowany przez PI mechanizm TADF pozwala skrócić ten czas życia do 0,1 mikrosekundy.

Ale jakie są zalety krótkich czasów życia stanów wzbudzonych?

Stabilność materiału lub samego urządzenia OLED zależy od tego, jak długo żyje stan wzbudzony. Wiele, jeśli nie większość szkodliwych procesów prowadzących do degradacji emitera zachodzi, gdy cząsteczka pozostaje w stanie wzbudzonym. Skrócenie czasu życia stanu wzbudzonego o 10-100 razy pozwala na zwiększenie stabilności kompleksów irydu – kluczowego aspektu dla zastosowań przemysłowych. Na przykład: obecna technologia OLED wykorzystuje tylko barwniki irydowe do czerwonych i zielonych pikseli, podczas gdy niebieskie piksele opierają się na mniej energooszczędnych barwnikach bez irydu. Uzyskanie stabilnych i emitujących niebieski kolor barwników irydowych rozwiązałoby krytyczne problemy w branży OLED. Wygaszanie luminescencji w powietrzu zależy również od czasu życia stanu wzbudzonego – im krócej żyje stan wzbudzony, tym mniejsza jest redukcja wydajności świetlnej. Aspekt ten ma kluczowe znaczenie w zastosowaniach, w których nie można wykluczyć obecności powietrza: na przykład w przypadku stosowania barwnika luminescencyjnego do tkanek lub żywych komórek. W bliskiej podczerwieni barwniki luminescencyjne są poddawane procesom nieluminescencyjnym, które prowadzą do zmniejszenia wydajności świetlnej – jednym ze sposobów rozwiązania problemu jest przyspieszenie tempa zachodzenia procesów luminescencyjnych, jak zaproponowano w tym projekcie.

Celem tego projektu jest nie tylko rozwiązanie nierozstrzygniętych problemów związanych ze stabilnością i niezawodnością wysokowydajnych barwników luminescencyjnych, ale także poszerzenie zakresu podstawowej wiedzy o fundamentalnych właściwościach materii. Główny badacz przeprowadzi badania obliczeniowe, aby wyjaśnić mechanizmy luminescencyjne związków irydu w kontekście TADF.