

Streszczenie

Wraz z rozwojem technologii, urządzenia elektroniczne stały się istotnym elementem w działalności współczesnego człowieka, towarzysząc mu w większości sfer jego życia. Powszechność telefonów komórkowych, tabletów czy komputerów jest na to najlepszym dowodem. Działanie wielu z nich wiąże się z użyciem materiałów, zdolnych do emisji światła pod wpływem dostarczenia im energii z zewnątrz, co ma miejsce na przykład w wyświetlaczach. Makroskopowe cechy takich urządzeń emitujących światło jak barwa, jasność czy trwałość, są uzależnione od rodzaju użytych związków chemicznych (emiterów) i ich właściwości fotofizycznych na poziomie molekularnym. Dzięki zgromadzonej do tej pory wiedzy na ich temat, współcześnie projektowane emitery charakteryzują się bardzo dobrymi parametrami, a żywotność urządzeń zbudowanych z takich związków, nie stanowi ograniczenia w ich funkcyjności.

Problem w tym, że kluczowe materiały wszystkich powszechnie dostępnych urządzeń optoelektronicznych zbudowane są z nieorganicznych lub hybrydowych związków, zawierających w swojej strukturze ciężkie metale takie jak iryd, platynę, ziemie rzadkie itd. Ograniczony dostęp tych pierwiastków uzależniony od czynników geograficznych, politycznych i ekonomicznych to jeden z kluczowych powodów, dla którego koszty produkcji tych urządzeń są na wysokim poziomie. Co więcej, toksyczność metali przejściowych dyskwalifikuje takie materiały z niektórych zastosowań oraz komplikuje metody ich utylizacji. W związku z powyższym, inwestycje we wdrażanie mniej szkodliwych i łatwiej dostępnych materiałów stanowią jeden z aktualnych wiodących kierunków naukowych i uznany priorytet badawczo-rozwojowy. Niestety, technologia wytwarzania urządzeń opartych o przyjazne środowisku materiały organiczne nie osiągnęła jeszcze wymaganego przez przemysł poziomu dojrzałości. Do głównych problemów przez które do tej pory nie udało się zastąpić kluczowych elementów ich organicznymi odpowiednikami należą niska wydajność oraz stabilność organicznych związków, z których buduje się komponenty takich urządzeń. Dotyczy to między innymi nowoczesnych materiałów emitujących światło będących przedmiotem badań niniejszej dysertacji.

Rozprawa doktorska dotyczy badań właściwości fotofizycznych i fotochemicznych wybranych związków organicznych emitujących światło, odznaczających się wysokim potencjałem aplikacyjnym w urządzeniach optoelektronicznych. Podstawowym jej celem jest zrozumienie mechanizmów fotoindukowanych procesów zachodzących w stanach wzbudzonych, warunkujących wydajność emisji światła oraz odpowiedzialnych za fotostabilność emiterów.

Pierwsza część pracy poświęcona jest opisowi przeprowadzonych badań nad związkami z grupy 2'-hydroksychalkonów, w których zachodzi zjawisko wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym (ESIPT) oraz zjawisko emisji indukowanej agregacją (AIE). Pomimo bardzo atrakcyjnych właściwości fotofizycznych, molekuly te są wyjątkowo niestabilne i łatwo ulegają licznym

fotoindukowanym procesom, prowadzącym do utworzenia nowych cząsteczek, pozbawionych korzystnych cech emisyjnych. Ponieważ stabilność jest kluczowym parametrem decydującym o możliwości zastosowania związków w optoelektronice, przedstawione w pracy badania dostarczają szczegółowej wiedzy o mechanizmie fotodegradacji z uwzględnieniem poszczególnych jej etapów a także sposobach jej kontroli. Używając standardowych metod doświadczalnych oraz współczesnych narzędzi teoretycznych, dokonano opisu sześćoetapowej ścieżki, składającej się wielu pojedynczych procesów takich jak transfer protonu, izomeryzacja *s-cis* – *s-trans* i cyklizacja. Zebrane dane i podjęte próby badawcze dowodzą temu, że reakcję można całkowicie zatrzymać na wczesnym jej etapie, co w przyszłości ułatwi wdrażanie na rynek tych (i podobnych) emiterów.

Druga część rozprawy dotyczy organicznych emiterów, w których zachodzi zjawisko termicznie aktywowanej opóźnionej fluorescencji (TADF), stanowiących w tej chwili bardzo młodą, ale dynamicznie rozwijaną klasę obiektów, głównie zorientowaną na zastosowanie w nowoczesnych OLED. Przedstawione badania koncentrują się na próbie rozwiązania aktualnego problemu w tych związkach, związanego ze zbyt wolnym odwrotnym przejściem międzysystemowym. Przedmiotem badań są niebieskie i czerwone emitery cieszące się największym zapotrzebowaniem na moment przygotowywania rozprawy. Konkretniej, doświadczalnej weryfikacji zostaje poddany koncept udoskonalenia właściwości fotofizycznych emiterów TADF, polegający na wprowadzeniu do ich struktury łatwo dostępnych ciężkich atomów w celu wzmocnienia sprzężenia spin-orbita i przyspieszenia konwersji wzbudzonych stanów trypletowych do singletowych, wskutek czego możliwa jest wydajna elektroluminescencja. Na podstawie przeprowadzonych pomiarów fotofizycznych oraz dzięki opracowanej metodologii analizy danych doświadczalnych ustalono, że tzw. efekt ciężkiego atomu, w określonych warunkach korzystnie wpływa na parametry luminescencyjne zmodyfikowanych emiterów. Za pomocą szczegółowych obliczeń teoretycznych skorelowanych z obserwacjami doświadczalnymi, określono jaki jest mechanizm zjawiska TADF i wskazano najbardziej istotne czynniki, wpływające na jego wydajność.