

## Projekt 3.11 Projektowanie i Modelowanie Komputerowe Nowych Emiterów dla Organicznych Diod Elektroluminescencyjnych

**Promotor:** dr hab. Adam Kubas/ dr Michał Kochman

**Instytut:** Chemii Fizycznej PAN

**Zespół:** Zespół 20. Kataliza kooperatywna - dr hab. Adam Kubas, profesor instytutu

**www:** [www.coopcat.pl](http://www.coopcat.pl)

### Opis:

Trzecia generacja emiterów dla organicznych diod elektroluminescencyjnych (OLED-ów) oparta jest na wykorzystaniu zjawiska aktywowanej termicznie opóźnionej fluorescencji (thermally activated delayed fluorescence – TADF). Wydajna emisja światła poprzez TADF wymaga jednoczesnego spełnienia kilku warunków: emiter musi cechować się niskim odstępem energetycznym pomiędzy najniższym singletowym stanem wzbudzonym, a najniższym stanem trypletowym; musi wykazywać duży moment przejścia pomiędzy najniższym singletowym stanem wzbudzonym, a stanem podstawowym; wreszcie procesy deaktywacji bezpromienistej muszą być mniej wydajne, niż emisja światła. Ponadto pożądanym jest, aby pasmo emisji mieściło się w wąskim zakresie długości fal.

Z uwagi na złożoność zjawiska TADF, rozwój nowych emiterów wymagał dotąd żmudnej syntezy i badania wielu związków-kandydatów. Nadzieję na zmianę tego stanu rzeczy, i znaczne przyspieszenie badań, daje postęp w przybliżonych metodach kwantowomechanicznych zorientowanych na obliczenia własności fotofizycznych dużych cząsteczek.[1,2] W coraz większym stopniu możliwe jest przewidywanie własności potencjalnych emiterów, zanim jeszcze zostaną zsyntetyzowane i zbadane doświadczalnie.

#### Bibliografia

[1] L. Kunze, A. Hansen, S. Grimme, J.-M. Mewes, J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 8470–8480.

[2] L. Kunze, T. Froitzheim, A. Hansen, S. Grimme, J.-M. Mewes, ChemRxiv. 2024..

### Cel projektu:

Założeniem projektu jest zaprojektowanie nowych emiterów dla OLED-ów w oparciu o modelowanie komputerowe. Badania skupią się w szczególności na N/N-domieszkowanych wielopierścieniowych węglowodorach aromatycznych i będą odbywały się w ścisłej współpracy z zespołami eksperymentalnymi (dra Marcina Lindnera z Instytutu Chemii Organicznej PAN oraz prof. Przemysława Daty z Politechniki Łódzkiej). W zależności od tempa i wyników badań, zaprojektowane przez doktoranta/kę emitory mogą zostać zsyntetyzowane i zbadane spektroskopowo.

Na pierwszym etapie badań opracowane zostaną algorytmy optymalizacji struktury chemicznej emitera w celu osiągnięcia zadanych własności. W szczególności przewidywane jest wykorzystanie algorytmów genetycznych i/lub symulowanego wyżarzania. Inną możliwością stanowi wygenerowanie bazy związków-kandydatów, a następnie odsianie tych najbardziej obiecujących. Następnie, przeprowadzone zostaną systematyczne poszukiwania emiterów o pożądanym właściwościach fotofizycznych

### Wymagania:

- tytuł magistra fizyki, chemii, lub kierunku pokrewnego;
- doświadczenie w programowaniu komputerowym;
- biegła znajomość systemu operacyjnego Linux;
- podstawowa w zakresie fotochemii i fotofizyki związków organicznych

**Kontakt:** [akubas@ichf.edu.pl](mailto:akubas@ichf.edu.pl), [mkochman@ichf.edu.pl](mailto:mkochman@ichf.edu.pl)