

# Legiruoti organiniai kristalai su itin aukšta atgalinės interkombinacinės konversijos sparta

## Doped organic crystals with high reverse intersystem crossing rate

Gediminas Kreiza<sup>1</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>, Edvinas Orentas<sup>2</sup>, Karolis Kazlauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Fotonikos ir nanotechnologijų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

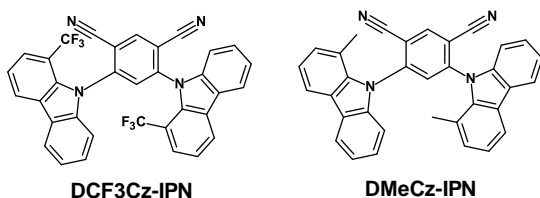
<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Organinės chemijos katedra, Naugarduko g. 24, LT-03225

Vilnius

[gediminas.kreiza@ff.vu.lt](mailto:gediminas.kreiza@ff.vu.lt)

Molekuliniai spinduoliai, pasižymintys šiluma aktyvuota uždelstą fluorescencija (TADF), yra patrauklūs dėl galimybės juos panaudoti našiuose OLED prietaisuose. Norint pasiekti aukštą prietaisų našumą ir žemus našumo nuokryčius, esant didelėms srovėms, reikalingos tokios spinduolių fluorescencijos savybės kaip aukšta atgalinė interkombinacinė konversija ir trumpa uždelstosios fluorescencijos trukmė.

Siekiant realizuoti giliai mėlyną TADF spinduliuotę su aukštomis atgalinės interkombinacinės konversijos spartomis (KRISC) buvo modifikuotas anksčiau mūsų grupės publikuotas dimetilkarbazolo/izoftalonitrilo TADF spinduolis (DMeCz-IPN). Cheminės sintezės metu karbazolo donorų metilo grupės buvo pakeistos akceptorinio pobūdžio CF<sub>3</sub> grupėmis, taip suformuojant naują junginį DCF3Cz-IPN (1 pav.). Trifluorometilo grupių panaudojimas tokioje karbazolo pozicijoje, mūsų žiniomis, yra unikalus ir, taip pat, patrauklus dėl didesnės erdvinės sąveikos su akceptoriumi ir teigiamos šių grupių įtakos elektronų transporto savybėms.

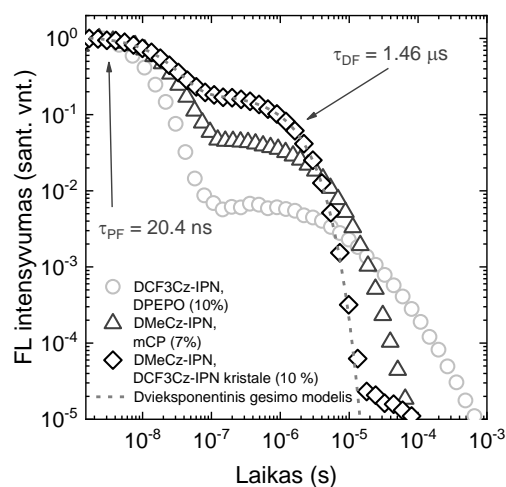


1 pav. Tirtų spinduolių molekulinė struktūra.

Vykdam tyrimus, buvo pastebėta, kad DCF3Cz-IPN ir DMeCz-IPN junginiai dėl, sąlyginai, panašios molekulinės geometrijos itin lengvai formuoja kokristalus. Šie kristalai išlaikė nepakitusių pakavimąsi ir kristalinės gardelės parametrus legiruojant DMeCz-IPN junginiu net koncentracija siekiančia iki 10%. Kadangi DMeCzIPN junginys pasižymi mažesnės energijos spinduliuote nei CF<sub>3</sub> grupės turintis jo atitikmuo, pavyko sukurti unikalią efektyvia Fiersterio pernaša pasižyminčių TADF kristalų sistemą.

Panaudojus tokią sistemą galima ženkliai sumažinti DMeCzIPN spinduolio uždelstosios fluorescencijos trukmę ( $t_{DF} = 1,46 \mu s$ , 2 pav.) ir padidinti RISC spartas ( $k_{RISC} = 1,1 \times 10^7 s^{-1}$ ) išlaikant aukštą fluorescencijos kvantinį našumą (0,8). Toks ženklus pagrindinių TADF savybių pagerėjimas siejamas su DMeCzIPN junginio molekulinės geometrijos pakitimu – junginys įterptas į DCF3Cz-IPN kristalą dėl tarpmolekulinių sąveikų yra priverstas užimti „šeimininko“ sistemos molekulinę

geometriją. Taip pat kieta spinduolio aplinka neleidžia ženkliai molekulinės geometrijos pakitimų vykstant sužadintų būsenų relaksacijai. Dėl šių priežasčių buvo išvengta TADF spinduoliams būdingų struktūrinės tinkleto nulemtų žalingų efektų, tokių kaip FL gesimo trukmių pailgėjimas, spektro išplatėjimas ir pan.



2 pav. Tirtų bandinių fluorescencijos kinetikos

Tirti legiruoti kristalai taip pat pasižymėjo aukštu morfologiniu- bei foto-stabilumu, o gaminant plonus polikristalinius sluoksnius pavyko išlaikyti nepakitusius TADF parametrus. Todėl šiuo metu vystoma technologija panaudoti tokio pobūdžio polikristalinį emisinį sluoksnį OLED struktūroje. Tikimasi, kad tai leistų realizuoti ilgą prietaisų veikimo trukmę pasižyminčius TADF OLED, kadangi be aptartų savybių, įprastai molekuliniai kristalai taip pat siejami su geromis krūvininkų transporto savybėmis.

*Reikšminiai žodžiai: fluorescencija, TADF, OLED, izoftalonitrilas.*