

Łamiące Regułę Hunda cząsteczki jako prekursorzy nowych materiałów optoelektronicznych

A. L. Sobolewski

*Institut Fizyki
Polskiej Akademii Nauk,
al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa
e-mail: sobola@ifpan.edu.pl*

Prawie sto lat temu Friedrich Hund sformułował swoje sławne zasady, zgodnie z którymi, dla danej konfiguracji elektronowej term z maksymalną wartością multipletowości ma najniższą energię [1]. Reguła ta stanowi podstawę dla diagramu Jabłońskiego powszechnie stosowanego przy dyskusji spektroskopii i fotofizyki cząsteczek [2]. Pierwsze stabilne łamiące tę Regułę cząsteczki zostały przewidziane przy wykorzystaniu metod ab initio teorii struktur elektronowych dopiero w roku 2019 [3, 4]. Dalsze badania teoretyczne wykazały, że cząsteczki te reprezentują szeroką klasę związków organicznych, w których najniższy wzbudzony stan singletowy (S1) leży poniżej wzbudzonego stanu trypletowego (T1) [5].

Odkrycie to może mieć ważne praktyczne konsekwencje w dziedzinie organicznych diod luminescencyjnych (OLED), gdzie – zgodnie ze statystyką spinową – rekombinacja wytworzonych napięciem elektrycznym ładunków prowadzi do utworzenia (emitujących) singletów i (ciemnych) trypletów w stosunku 1:3. Oznacza to, że wydajność kwantowa luminescencji tych materiałów nie może nominalnie przekraczać 25%. Łamiące Regułę Hunda cząsteczki (IST) mogą stanowić podstawę dla nowej generacji organicznych materiałów optoelektronicznych, które mogą osiągać 100% wydajność konwersji elektronów w fotony [6].

W prezentacji przedstawione zostaną wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych, przeprowadzonych dla szerokiej klasy cząsteczek typu IST w celu zrozumienia fundamentalnych mechanizmów elektronowych i strukturalnych, leżących u podstaw tego zjawiska.

Podziękowania

Prace prowadzono w ramach projektu OPUS nr 2020/39/B/ST4/01723.

Bibliografia

- [1] Hund F., Z. Phys. 40, 742 (1927).
- [2] Jabłoński A., Nature 131, 839 (1933).
- [3] Ehrmaier J., Rabe E., Pristash S., Corp K., Schlenker C., Sobolewski A. L., Domcke W., J. Phys. Chem. A, 123, 8099-8108 (2019).
- [4] de Silva P., J. Phys. Chem. Lett. 10, 5674 (2019).
- [5] Pios S., Huang X., Sobolewski A. L., Domcke W., PCCP 23, 12968-12975 (2021).
- [6] Sobolewski A. L., Domcke W., J. Phys. Chem. Lett. 12, 6852-6860 (2021).