

ВПЛИВ ІЗОТОПНОГО ЕФЕКТУ НА ПРОДУКТИВНІСТЬ OLEDs

Лазери, польові транзистори та різні типи органічних світлодіодів (OLEDs) [1, 2], непомітно для нас роблять повсякденне життя зручним та комфортним, вони оточують нас у вигляді складових смартфонів, комп'ютерів, телевізорів, тощо. Органічні оптичні матеріали, які мають безліч застосувань в сучасній оптоелектроніці, складаються з молекул хоста та гостя. Всі вони мають подібні архітектурні конструкції, в основі яких лежать значні здобутки в сфері складних молекулярних оптичних матеріалів. Сучасні OLEDs, складові яких ми розглянемо більш детально в роботі, використовують ефект термічно активованої уповільненої флуоресценції (TADF). Вони складаються з доволі простих ароматичних сполук (без благородних важких металів) та демонструють високу внутрішню квантову ефективність, яка сягає майже 100% [3].

У цьому дослідженні ми представили дейтерованій хост, а саме 2,6-ди(9H-карбазол-9-іл-)піридин-d16 (PYD2Cz-d16) (рис. 1а), який застосовується в виготовленні TADF-OLED, щоб дослідити вплив ізотопу на ефективність OLED, особливо, експлуатаційну стабільність пристрою. Фотофізичні властивості PYD2Cz-d16 подібні до недейтерованих PYD2Cz; однак фізичні властивості їх тонких плівок досить різні [1].

Для підтвердження правильності наших розрахунків ми порівняли розраховані інфрачервоні (ІЧ) спектри PYD2Cz та PYD2Cz-d16, що показані на рис. 1б, з експериментальними значеннями [1], в яких піки ароматичного розтягування C—H та C—D можна знайти на частотах 3042 та 2282 cm^{-1} для молекул PYD2Cz та PYD2Cz-d16, відповідно.

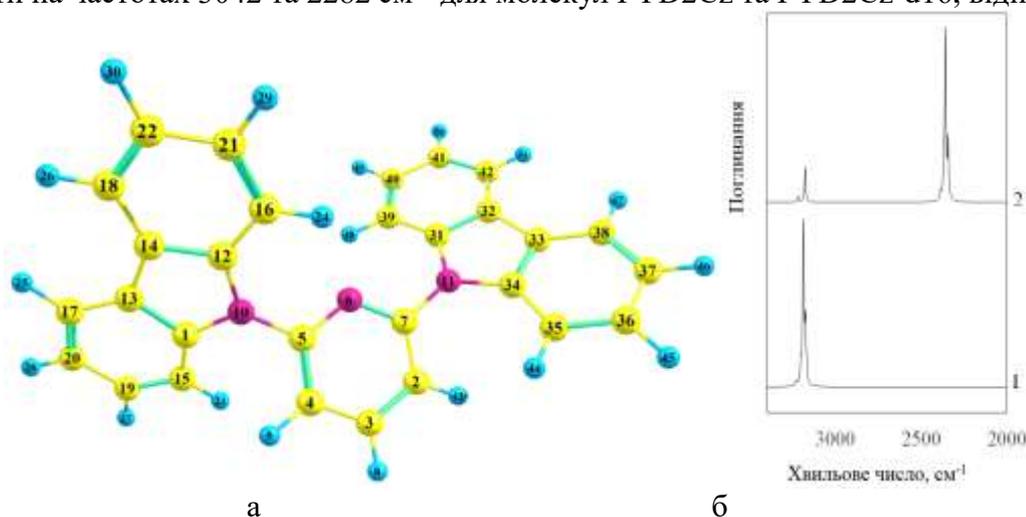


Рис. 1. Структура молекули PYD2Cz (а); розраховані ІЧ-спектри для молекул PYD2Cz та PYD2Cz-d16: 1 – PYD2Cz, 2 – PYD2Cz-d16 (б).

Важливі для нас коливання відмічено в таблиці 1. Коли ми замінюємо гідроген на дейтерій, змінюється частота коливань і їх амплітуда. Адже, якщо продейтерувати молекули гостя, що випускають випромінювання, ми можемо очікувати позитивний вплив на ефективність TADF та час роботи OLEDs. Ці коливання відбуваються на стику двох молекул, і ми спостерігаємо відштовхування між молекулами. Внаслідок чого відбувається значна зміна відстаней між даною молекулою і сусідньою. Всі ці вектори будуть працювати над переносом електронів. З таблиці 1 помітно, що дейтерування впливає на частоту однотипних коливань. Важливо зосереджуватись на коливаннях, в яких задіяні ароматичні цикли молекули, адже саме вони є міжпросторовими і беруть активну участь при побудові шарів OLEDs, на відміну від піридинової частини. Кожне коливання має свою характерну рису, яку можна відмітити. Тому подальше порівняння коливань дейтерованої молекули PYD2Cz-d16 з PYD2Cz є дуже

важливим для пояснення кращої ефективності та стабільності OLEDs на основі дейтерованої сполуки.

Таблиця 1

Деякі розраховані частоти, інтенсивності І_R та пояснення коливальних мод для молекул PYD2Cz та PYD2Cz-d16, розрахованих методом B3LYP/6-311++G(d,p).

№	DFT част. PYD2Cz	I _R	DFT част. PYD2Cz-d16	I _R	Пояснення
v ₁₄₀	3190	59.3	2362	14.1	асиметричні С–Н коливання в ароматичних кільцях, що відповідають за міжмолекулярні відштовхування молекул
v ₁₃₆	3176	9.1	2347	0.9	
v ₁₃₅	3176	5.0	2347	5.1	
v ₁₃₄	3175	16.5	2346	4.2	
v ₁₀₂	1338	48.5	1300	102.4	асиметричні С–С коливання кільця, дещо спостерігається зміна кута С–С–Н
v ₁₀₁	1338	5.2	1235	61.4	
v ₁₀₀	1336	75.5	1221	3.9	симетричні С–С та С–Н коливання кільця, значні зміни кутів С–С–Н та С–С–С в ароматичних кільцях
v ₉₃	1215	2.3	1064	6.0	деформаційні, міжплощинні коливання, змінюються кути С-С-Н
v ₉₂	1210	101.3	1047	5.1	
v ₉₁	1187	5.2	1047	3.1	
v ₉₀	1184	0.0	1033	1.5	

В даній роботі підтверджено ізотопний ефект матеріалу-хазяїна, тобто PYD2Cz та PYD2Cz-d16, на продуктивність OLEDs у TADF-OLED. Хоча фотофізичні властивості обох хостів майже однакові, було встановлено, що фізичні властивості хостів у тонкоплівкових станах були помітно різними [1-3]. Наша робота могла б пояснити, чому ефект ізотопу водню/дейтерію покращує стабільність OLEDів з огляду на теплові та транспортні властивості носія. Таким чином, що наше дослідження може надати уявлення про досягнення стабільних TADF/Ph/флуоресценції-OLED за рахунок дейтерування органічних функціональних матеріалів.

Список використаних джерел і літератури

1. Liu X. Isotope Effect of Host Material on Device Stability of Thermally Activated Delayed Fluorescence Organic Light-Emitting Diodes / X. Liu, C.-Y. Chan, F. Mathevet, M. Mamada, Y. Tsuchiya, Y.-T. Lee, H. Nakanotani, S. Kobayashi, M. Shiochi, C. Adachi // Small Sci. – 2021.
2. Minaev B. F. Principles of phosphorescence organic light-emitting devices / B. F. Minaev, G. V. Baryshnikov, H. Agren // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 16. – P. 1749–1758.
3. Adachi C. Third-Generation Organic Electroluminescence Materials / C. Adachi // Jpn. J. Appl. Phys. – 2014. – Vol. 53. – P. 060101.

Науковий керівник: д.х.н., професор Мінаєв Б.П.

Щербушенко Є.Р.

Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького

РОЗВИТОК ТВОРЧИХ ЗДІБНОСТЕЙ УЧНІВ НА УРОКАХ ХІМІЇ ПІД ЧАС КОЛЕКТИВНОЇ РОБОТИ В КЛАСІ

Розвиток України в освітньо-навчальному процесі стрімко набуває обертів. Впровадження новітньо-інтеграційних процесів, що відбуваються в сфері освіти, суттєві зміни в економічному житті потребують перебудови та удосконалення системи освіти, що передбачає розробку, введення в навчально-виховний процес нових технологій навчання і виховання учнів. На сьогодні для учнів повинні бути створені всі умови для його повноцінного