



Silesian University of Technology
Faculty of Chemistry
Department of Physical Chemistry and
Technology of Polymers



Welisson de Pontes Silva

DOCTORAL DISSERTATION

*Design, Synthesis, and Investigation of the Photophysical and
Electrochemical Properties of Selected Conjugated Molecules Belonging
to Various Classes of Compounds*

Promoter: Prof. Dr hab. inż. Mieczysław Łapkowski

Assistant Promoter: Dr inż. Radosław Motyka

Gliwice 2023

Abstrakt

Opracowywanie nowych materiałów organicznych do zastosowań optoelektronicznych, takich jak OLED czy OPV, nadal stanowi wyzwanie ze względu na zapotrzebowanie rynku na bardziej wydajne urządzenia, które mogą działać przy minimalnym zużyciu energii. Projektowanie związków czysto organicznych, wykazujących właściwości TADF może być doskonałą strategią otrzymywania wydajnych urządzeń OLED. Projektowanie emiterów TADF polega na takim łączeniu związków o charakterze elektronoakceptorowym (A) ze związkami o charakterze elektronodonorowym (D), aby ich końcowa struktura (D-A) przyjęła formę skręconą. Uzyskuje się w ten sposób przestrzenne rozdzielenie orbitali HOMO i LUMO, oraz zwężenie przerwy energetycznej pomiędzy stanami singletowym a trypletowym, co może umożliwić wydajny proces RISC.

W pracy przedstawiono projektowanie i syntezę połączeń akceptorów (A) należących do różnych klas związków oraz powszechnie używanych ugrupowań donorowych (D) (difenylamina, karbazol, fenotiazyna, fenoksazyna, pochodne akrydyny i pochodne azepiny), w wielu konfiguracjach typu donor-akceptor (D-A), w celu zbadania ich właściwości fotofizycznych oraz elektrochemicznych, a w konsekwencji przydatności do zastosowań w optoelektronice. Końcowe związki zsyntetyzowano stosując reakcje sprzęgania krzyżowego typu N-C i C-C pomiędzy bromowanymi akceptorami i związkami donorowymi, uzyskując umiarkowane bądź dobre wydajności. Plan projektowania akceptorów obejmował tworzenie układów bogatych w azot, takich jak: acenaftopirydopirazyna, naftalenobenzimidazol, dichinoksalina, difenazyna, pochodne izomerów pirydobenzotriazolu, benzopirydoimidazoizochinolinon, dibezwodnik i tetraestry perylenu oraz trifenylfosfanimina.

Wszystkie akceptory łączono z powszechnie stosowanymi donorami, a strukturę molekularną produktów scharakteryzowano za pomocą magnetycznego rezonansu jądrowego ^1H i ^{13}C (NMR) oraz wysokorozdzielczej spektrometrii masowej (HRMS). Właściwości elektrochemiczne badano za pomocą woltamperometrii cyklicznej (CV), a energie poziomów HOMO i LUMO oszacowano, odpowiednio, na podstawie potencjałów utleniania i redukcji. Dodatkowo niektóre związki wykazały podatność na proces polimeryzacji elektrochemicznej. Parametry fotofizyczne badano metodą UV-Vis i fotoluminescencji w roztworze oraz w stanie stałym w matrycy Zeonex. W celu zrozumienia natury emisji związków (CT i/lub LE), badania prowadzono w rozpuszczalnikach o różnej polarności. Ponadto dla pochodnych acenaftopirydopirazyny i trifenylfosfaniminy zbadano właściwości emisji indukowanej agregacją (AIE) w mieszaninach THF-u i wody w różnych proporcjach. Właściwości otrzymanych materiałów wykazały, że związki te mogą być doskonałymi kandydatami do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych.