

Analysis of interactions in donor-acceptor compounds and their application in organic light-emitting diodes (OLEDs)

(Summary in Polish)

Department of Physical Chemistry and Technology of Polymers

Faculty of Chemistry

Silesian University of Technology

Ph.D. Student: M.Sc. Nicolas Oliveira Decarli

Supervisor: Prof. dr hab. inż. Przemysław Data

Co-supervisor: Dr inż. Piotr Pander



Lista skrótów:

- AIE – indukowana emisja indukowana agregacją (*ang. aggregation-induced emission*)
- AIEE – wzmocnienie emisji indukowane agregacją (*ang. aggregation-induced emission enhancement*)
- DF – opóźniona fluorescencja (*ang. delayed fluorescence*)
- EA – powinowactwo elektronowe (*ang. electron affinity*)
- EBL – warstwa blokująca elektrony (*ang. electron blocking layer*)
- EIL – warstwa wstrzykująca elektrony (*ang. electron injection layer*)
- EML – warstwa emisyjna (*ang. emissive layer*)
- EQE – zewnętrzna wydajność kwantowa (*ang. external quantum efficiency*)
- ETL – warstwa transportująca elektrony
- FWHM – szerokość widma w połowie wysokości (*ang. full width at half maximum*)
- HBL – warstwa blokująca dziury
- HIL – warstwa wstrzykująca dziury
- HTL – warstwa transportująca dziury
- HOMO – najwyższy obsadzony orbital molekularny
- IP – potencjał jonizacji
- IQE – wewnętrzna wydajność kwantowa
- ISC – przejście międzysystemowe
- ITO – tlenek indu i cynku
- LUMO – najniższy nieobsadzony orbital molekularny
- OLED – organiczne diody elektroluminescencyjne
- PF – fluorescencja natychmiastowa
- PLQY – wydajność kwantowa fotoluminescencji
- RISC – odwrócone przejście międzysystemowe
- RTP – fosforescencja w temperaturze pokojowej
- S₀ – stan podstawowy singletowy
- S₁ – pierwszy singletowy stan wzbudzony
- SOC – sprzężenie spin-orbita
- T₁ – pierwszy trypletowy stan wzbudzony
- TADF – termicznie aktywowana opóźniona fluorescencja
- ΔE_{ST} – różnica między energią stanów S₁ i T₁

Lista Publikacji:

1. W. P. Silva, **N. O. Decarli**, L. Espíndola, K. Erfurt, A. Blacha-Grzechnik, P. Pander, M. Lapkowski and P. Data “Multifunctional Properties of D-A Luminophores Based on Acenaphthopyrido[2,3-b]pyrazine Core: Photophysics, Photochemistry, and Efficient Solution-Processed OLEDs.” *J Mater Chem C*. **2023**, 1, 3777. **doi:10.1039/D3TC02860G**
2. P. P. Abatti, **N. O. Decarli**, S. Gogoc, P. Data, I. H. Bechtold, E. Westphal and H. Gallardo. “Shedding Light on Highly Emissive 1,4-Dihydropyrrolo[3,2-b]pyrrole Derivatives: Synthesis and Aggregate-Dependent Emission.” *Chempluschem*, **2023**, e202300539. **doi:10.1002/cplu.202300539**
3. T. Hosono, **N. O. Decarli**, P. Z. Crocomo, T. Goya, L. E. de Sousa, N. Tohnai, S. Minakata, P. de Silva, P. Data and Y. Takeda. “The regioisomeric effect on the excited-state fate leading to room-temperature phosphorescence or thermally activated delayed fluorescence in a dibenzophenazine-cored donor-acceptor-donor system.” *J. Mater. Chem. C*, **2022**, 10, 4905-4913 **doi:10.1039/d1tc05730h**
4. **N. O. Decarli**, E. Zapp, B. S. de Souza, E. R. Santana, J. P. Winiarski and I. C. Vieira. “Biosensor based on laccase-halloysite nanotube and imidazolium zwitterionic surfactant for dopamine determination.” *Biochem Eng J.*, **2022**, 186, 108565. **doi:10.1016/j.bej.2022.108565**
5. S. Goto, Y. Nitta, **N. O. Decarli**, L. E. de Sousa, P. Stachelek, N. Tohnai, S. Minakata, P. de Silva, P. Data and Y. Takeda. “Revealing the internal heavy chalcogen atom effect on the photophysics of the dibenzo[a,j]phenazine-cored donor-acceptor-donor triad.” *J. Mater. Chem. C*, **2021**, 9, 13942-13953. **doi:10.1039/d1tc02635f**

1. Streszczenie

Ta praca eksploruje cztery serie związków o różnych strukturach rdzeni (akceptorów), a mianowicie **PyBTA** ([1,2,3]triazolo[4,5-b]pirydyna), **NQPy** (acenaphtopyrido[2,3-b]pirazyna), **TTT** (tris([1,2,4]triazolo)[1,3,5]triazyna) oraz **JAP** (dibenzo[a,j]fenazyna), przeznaczone do zastosowania w urządzeniach OLED. Różne kombinacje cząsteczek donora-akceptora zostały scharakteryzowane i zastosowane z powodzeniem w urządzeniach. Dla związków **PyBTA** opracowano trzy różne izomery poprzez zmianę położenia grupy metylowej, z trzema różnymi donorami dla każdego z nich. Niektóre z tych związków wykazywały fosforescencję w temperaturze pokojowej (RTP), podczas gdy inne wykazywały właściwości termicznie aktywowanej opóźnionej fluorescencji (TADF). W fotofizyce związków **PyBTZ-x-PTZ** i **PyBTZ-x-PXZ** zaobserwowano wkłady różnych konformerów w emisjach PF i DF, przypisując je do konformerów aksjalnych (*axial*) i ekwatorialnych (*equatorial*) donorów **PTZ** (fenotiazyna) i **PXZ** (fenoksazyna). Pochodne **NQPy** prezentowały wielofunkcyjne właściwości, wykazując TADF, RTP lub RTP/TADF, które można było modyfikować doбором donora. Dodatkowo wykazały efektywną generację tlenu singletowego i charakteryzowały się cechami emisji indukowanej agregacją (AIE) oraz indukowanemu agregacją wzmocnienia emisji (AIEE). Seria związków **TTT** była badana z podstawieniem grup metylowych w różnych miejscach w molekuale, co prowadziło do znacznych zmian w ich fotofizyce. Wszystkie trzy pochodne wykorzystywały **PTZ** jako donora, a obecność konformerów była obserwowana w emisjach PF i DF. Dodanie grupy metylowej do donora niemalże zlikwidowało właściwości DF, podczas gdy dodanie grupy metylowej do łącznika fenyłowego zmniejszyło wkład DF w porównaniu z pochodną bez grupy metylowej, choć wkład DF pozostał wyraźny. Ponadto, pochodne **TTT** wykazywały również efektywne właściwości agregacyjne, takie jak AIEE. Regioizomery związków **JAP** wykazywały właściwości TADF lub RTP w zależności od podstawienia donorem i jego rodzaju. Warto zauważyć, że wydajność OLED osiągnęła nawet 15,9% dla **PyBTA-2-PTZ**, 15,3% dla **NQPy-DMAC** i 12,4% dla **TTT-PTZ**, wszystkie wytworzone przy użyciu procesu roztworowego (mokrego).