

SILESIAAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FACULTY OF CHEMISTRY

**New poly(3-hexylthiophene)-based materials
for gas sensors and photovoltaic applications
- design and synthesis**

Kinga Kępska

Doctoral thesis

prepared under supervision of:

Prof. dr hab. inż. Mieczysław Łapkowski, corresponding PAS member

(supervisor)

Dr hab. inż. Agnieszka Stolarczyk, prof. PŚ

(assistant supervisor)

at the Department of Physical Chemistry and Technology of Polymers

Gliwice 2024

Streszczenie po polsku

Głównym celem pracy było zaprojektowanie i synteza nowej klasy kopolimerów szczepionych zawierających polimer skoniugowany, a następnie charakterystyka molekularna otrzymanych materiałów. Celem pobocznym było wstępne rozpoznanie możliwości zastosowania otrzymanych materiałów jako czujników dwutlenku azotu oraz w urządzeniach fotowoltaicznych.

Architekturę kopolimerów oparto na wbudowaniu do makrocząsteczki następujących segmentów: poli(3-heksylofenu) jako modelowego sprzężonego polimeru elektrondonorowego w obszarze fotowoltaiki organicznej oraz szkieletu polisiloksanowego jako obojętnego, elastycznego, stabilnego termicznie i środowiskowo rusztowania dla kopolimerów szczepionych. W celu dostosowania morfologii i właściwości optoelektronicznych otrzymanych materiałów zsyntezowano serię materiałów z różnymi ko-szczepionymi grupami (takimi jak niepolarny alkil lub polarny poli(glikol etylenowy)). Struktura macierzystego poli(3-heksylofenu) i kopolimerów została dokładnie zbadana technikami NMR i FT-IR, dodatkowo wspartymi analizą masy cząsteczkowej.

Kopolimery zawierające ko-szczepione polieterowe i alkilowe łańcuchy boczne zostały przetestowane jako niskotemperaturowe sensory gazów do wykrywania dwutlenku azotu. Kopolimery wykazywały wyższą odpowiedź na badany gaz niż czysty poli(3-heksylofenu). Wykazano, że szczególnie obecność segmentów poli(glikolu etylenowego) poprawiła czułość sensorów. Chociaż dynamika regeneracji sensorów w temperaturze pokojowej była wolna, została ona poprawiona przez podniesienie temperatury roboczej do 50-100°C i naświetlenie działającego czujnika światłem ultrafioletowym.

Kopolimery szczepione zawierające tylko poli(3-heksylofenu) oraz kopolimery zawierające ko-szczepione łańcuchy alkilowe zostały przetestowane jako ogniwa słoneczne o budowie heterozłącza z akceptorem fulerenowym. Ogniwa słoneczne oparte na polisiloksanie szczepionym poli(3-heksylofenu) i łańcuchami heksyłowymi osiągnęły sprawność porównywalną z urządzeniami opartymi na poli(3-heksylofenu). Co więcej, ogniwa słoneczne oparte na kopolimerach wykazały wyższą stabilność termiczną przy długotrwałym wygrzewaniu i nieco wyższą trwałość podczas przechowywania w atmosferze obojętnej w porównaniu do urządzeń opartych na poli(3-heksylofenu).

Podsumowując, otrzymane kopolimery okazały się obiecującymi związkami do dalszego rozwoju takich architektur molekularnych z możliwością precyzyjnego regulowania właściwości poprzez modyfikację struktury na poziomie molekularnym w celu uzyskania materiałów dostosowanych do zastosowań w wysoce selektywnych czujnikach gazu i organicznych ogniwach słonecznych.