

Nowa klasa zakrzywionych, policyklicznych węglowodorów aromatycznych opartych na cyklazynie do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych

Promotor: Dr hab. Marcin Lindner

Współczesna elektronika organiczna, mimo gwałtownego rozwoju, wciąż mierzy się z fundamentalnymi ograniczeniami strukturalnymi klasycznych układów aromatycznych. Tradycyjne, płaskie policykliczne węglowodory aromatyczne (PAHs) wykazują silną tendencję do agregacji typu π - π , co w fazie stałej prowadzi do znaczącego spadku wydajności luminescencji. Niniejsza rozprawa doktorska prezentuje przełomowe podejście do tego problemu, opierając się na precyzyjnym projektowaniu i syntezie nowej klasy zakrzywionych N-domieszkowanych układów PAHs o kształcie misy. Wykorzystując unikalny układ pierścieni 5-7-5, stworzyłem domieszkowaną azotem platformę molekularną, która wykazuje wklęsłą geometrię rdzenia, skutecznie eliminując oddziaływania π - π i otwierając drogę do uzyskania wysokich wydajności w urządzeniach.

Kluczowym elementem inżynierii molekularnej było wykorzystanie siedmioczłonowego pierścienia jako antyaromatycznego separatora orbitali HOMO-LUMO. Efektem tego jest zmniejszenie szerokości przerwy energetycznej singlet-tryplet (ΔE_{ST}), co sprzyja mechanizmowi termicznie aktywowanej opóźnionej fluorescencji (TADF). Opracowałem w pełni skalowalną, relatywnie prostą strategię syntetyczną, w wyniku której uzyskałem 14 stabilnych chemicznie i termicznie emiterów typu donor-akceptor (D-A), zróżnicowanych przez modyfikację fragmentu akceptorowego.

Wyniki badań fotofizycznych ujawniły wysoki potencjał opracowanych struktur, pozwalając na uzyskanie przestrajalnego mechanizmu emisji TADF/RTP (fosforescencja w temperaturze pokojowej) w odpowiednich matrycach. Prototypowe urządzenia OLED wykazały maksymalnie 12% zewnętrznej wydajności kwantowej EQE, co było jednym z najlepszych wyników literaturowych wśród zakrzywionych N-PAHs. Poprzez przejście od układów D-A do, wzbogaconych o zewnętrzny fragment donorowy, układów D-A-D, osiągnęliśmy istotny wzrost EQE do 21,9%. Jednocześnie uzyskaliśmy rekordowe wartości luminancji (do 30 100 cd/m²) oraz batochromowe przesunięcie emisji. W emiterach D-A-D zastosowałem łańcuch O-alkilowy poprawiający rozpuszczalność, który poprzez charakter elektronodonorowy planaryzował układ cykliczny, co nie zaburzyło jednak emisji TADF.

Opracowany rdzeń cyklazynowy zastosowaliśmy również w perowskitowych ogniwach słonecznych (PSC). Zsyntetyzowałem serię niedomieszkowanych materiałów transportujących dziury (HTM) sfunkcjonalizowanych bocznie o kształcie litery T. Nowatorskie układy N-PAHs pozwoliły na uzyskanie sprawności konwersji mocy (PCE) na poziomie 20,39%, przewyższając

wyniki powszechnie stosowanego w tym celu materiału oraz wykazując pożądaną dla ochrony perowskitu wysoką hydrofobowość.

Projekty te miały na celu uważną analizę modyfikacji strukturalnych oraz ich wpływu na właściwości fotofizyczne, a otrzymane wyniki mogą stanowić kompleksowy przewodnik po projektowaniu nowoczesnych, wielozadaniowych organicznych materiałów optoelektronicznych.