

Mgr inż. Kamila Olech

Promotor: Prof. dr hab. Jadwiga Sołoducho

Wydział Chemiczny, Zakład Chemii Medycznej i Mikrobiologii, Politechnika Wrocławska

Synteza oraz charakterystyka właściwości fizykochemicznych symetrycznych układów heterocyklicznych projektowanych do zastosowań w urządzeniach elektronicznych.

Przyszłością technologii opartej o molekularne materiały organiczne są energooszczędne, elastyczne, lekkie i niedrogie urządzenia elektroniczne. Atrakcyjne do tego typu zastosowań są cienkie półprzewodnikowe filmy wytworzone z polimerów elektroaktywnych zbudowanych na bazie układów heterocyklicznych. Związki te znajdują coraz szersze zastosowanie w urządzeniach optoelektronicznych, spintronicznych i elektromechanicznych. Pomimo otrzymania wielu półprzewodników organicznych nadal nie spełniają one wymogów ekonomicznych współczesnych technologii elektronicznych. Przy korzyściach takich jak elastyczność, łatwość modyfikacji, czy niższy koszt przetwarzania polimerów, wciąż aktualnym tematem jest poszukiwanie nowych układów o większej ruchliwości ładunków, stabilności w warunkach atmosferycznych i łatwości przetwarzania w roztworze.

Ze względu na interesujące właściwości trójcyklicznych układów heteroaromatycznych przeprowadziłam interdyscyplinarne badania prowadzące do otrzymania nowych, stabilnych oksydacyjnie, elektrochromowych polimerów donorowo-akceptorowych zbudowanych na bazie fenoksazyny, fenotiazyny, sililofluorenu, ksantenu oraz difenyloaminy. Związki do syntezy wyselekcjonowałam na podstawie obliczeń kwantowo-chemicznych, wykorzystujących metody DFT. Prowadzone badania obejmują szczegółową charakterystykę spektroskopową oraz elektrochemiczną szesnastu nowych zsyntezowanych oligomerów przewodzących. Porównanie wartości wyznaczonych teoretycznie z wynikami pomiarów potwierdziły dobrą korelację poszczególnych danych obliczeniowych z eksperymentalnymi oraz wskazały na użyteczność zastosowanych obliczeń *ab initio* w projektowaniu wielkocząsteczkowych półprzewodników organicznych. Otrzymane układy, wykazujące różnobarwną luminescencję w roztworze i/lub ciele stałym, posiadają szeroki potencjał aplikacyjny. Osadzone na powierzchni elektrody cienkie filmy oligomerów, o najciekawszych właściwościach optycznych i elektrycznych, zostały wykorzystane w budowie prototypowych urządzeń elektronicznych w szczególności do konstrukcji bioczuJNIKÓW optycznych.