

## Streszczenie pracy doktorskiej

*Synteza i badania półprzewodnikowego charakteru układów heterocyklicznych  
zaprojektowanych do zastosowań w urządzeniach sensorowych*

mgr inż. Dorota Justyna Zając

Promotor

prof. dr hab. Jadwiga Sołoducho

Wydział Chemiczny

Politechnika Wroclawska

Związki heterocykliczne, ze względu na właściwości przewodzące oraz elektroluminescencyjne, znajdują zastosowanie w nowoczesnych urządzeniach elektronicznych, m.in. w diodach elektroluminescencyjnych (OLED PLED, WPLED AMOLED), organicznych tranzystorach polowych (OPV), ogniwach słonecznych (DSSC, OPVC) oraz w urządzeniach sensorowych. Efektywność urządzeń optoelektronicznych w głównej mierze zależy od struktury związków organicznych stosowanych w ich budowie. Pomimo, że istnieje wiele znanych materiałów przewodzących, to jednak charakteryzują się one niezadowalającymi parametrami fizykochemicznymi (m. in. trwałość, rozpuszczalność, wydajność kwantowa). Z tego względu w pełni zasadne jest kontynuowanie badań poszukujących nowych układów heterocyklicznych stosowanych w różnych dziedzinach gospodarki.

Problemem badawczym podjętym w rozprawie doktorskiej była synteza nowych pochodnych układów tetrafenylosilanu, ditienosilolu oraz antracenu, wybranych w oparciu o badania kwantowo-chemiczne, wykonane metodą DFT (ang. *density functional theory*)

z wykorzystaniem funkcjonału hybrydowego B3LYP w bazie funkcyjnej cc-pvdz oraz metodą czasowo zależnego funkcjonału gęstości (TD-DFT). W tej części dysertacji zwrócono szczególną uwagę na poziomy energii orbitali HOMO/LUMO, wartość potencjału jonizacji oraz szerokość pasma wzbronionego, które wpływają na właściwości przewodzące układów.

Ważny aspekt badań stanowiła również analiza właściwości fizykochemicznych otrzymanych związków, m.in. charakterystyka widm UV-Vis, fluorescencji oraz woltamperometrii cyklicznej.

Efektom końcowym prowadzonych badań było otrzymanie stabilnych układów do zastosowania w cienkowarstwowych urządzeniach optoelektronicznych. Osadzone na powierzchni elektrody polimery pełniły funkcję przekaźnika elektronów w miniaturowych układach sensorowych. Zastosowanie takich rozwiązań (*in situ*) wiąże się z brakiem konieczności wstępnego przygotowania próbki, wysoką selektywnością i dokładnością pomiaru, szerokim spektrum działania, a także krótkim czasem odpowiedzi, łatwością użycia i niskimi kosztami eksploatacji.