

Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-0622-12**
Nové konjugované aromatické zlúčeniny s polovodičovými vlastnosťami (SemAC)

Zodpovedný riešiteľ **doc. RNDr. Martin Putala, PhD.**
Príjemca **Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

1. Katedra organickej chémie
2. Chemický ústav
3. Katedra anorganickej chémie
4. -
5. -

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Materials Research Centre, Brno University of Technology, Brno, Česká republika
2. Katedra biofyziky a fyzikálnej chémie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Karlova univerzita v Prahe, Česká republika
3. Electrical Engineering Department, Technological Educational Institute of Patras, Patras, Grécko

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

1. -
2. -
3. -

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Mihalis Fakis, Peter Hrobárik, Oleksandr Yushchenko, Ivica Sigmundová, Marius Koch, Arnulf Rosspeintner, Elias Stathatos, Eric Vauthey: „Excited State and Injection Dynamics of Triphenylamine Sensitizers Containing a Benzothiazole Electron-Accepting Group on TiO₂ and Al₂O₃ Thin Films.“ *Journal of Physical Chemistry C* 2014, 118, 28509–28519. (12 SCI citácií)
2. Mária Nečedová, Peter Magdolen, Veronika Nováková, Marek Cigáň, Silvia Vlčková, Pavol Zahradník, Andrea Fülöpová: „Synthesis and photophysical, electrochemical and theoretical study of thiazole-annelated phthalocyanines.“ *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 7053–7068.

3. Juraj Filo, Róbert Mišicák, Marek Cigáň, Martin Weis, Ján Jakobovič, Katarína Gmucová, Milan Pavúk, Edmund Dobročka, Martin Putala: „Oligothiophenes with the naphthalene core for organic thin-film transistors: variation in positions of bithiophenyl attachment to the naphthalene.“ *Synthetic Metals* 2015, 202, 73–81. (4 SCI citácie)
4. Lukáš Kerner, Katarína Gmucová, Jozef Kožíšek, Václav Petříček, Martin Putala: “ Easily oxidizable triarylamine materials with naphthalene and binaphthalene core: structure-properties relationship.” *Tetrahedron* 2016, 72, 7081-7092.
5. Mária Micháľková Nečedová, Peter Magdolen, Andrea Fülöpová, Veronika Nováková, Pavol Zahradník, Juraj Filo: „Synthesis, electrochemical, spectral and DFT study of novel thiazole-annelated subphthalocyanines with inherent chirality.“ *Dyes Pigments* 2016, 130, 24-26.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky prinášajú predovšetkým rozvoj poznania v interdisciplinárnej oblasti medzi organickou chémiou a (opto)elektronikou, dokumentovaný pôvodnými publikáciami v renomovaných karentovaných časopisoch. Pripravené a otestované originálne zlúčeniny majú potenciál uplatnenia v organických polom riadených tranzistoroch (OFET), organických svetlo-vyžarujúcich diódach (OLED), solárnych článkoch na báze organických farbív a vo fotodynamicknej terapii. Získané poznatky zároveň vytvárajú podklad pre navrhovanie štruktúr s ešte lepšími funkčnými vlastnosťami.

Projekt významne prispel k vzdelávaniu doktorandov a diplomantov zapojených do jeho riešenia.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Výsledkom riešenia projektu sú série originálnych štruktúr konjugovaných oligoaromatických systémov s pozoruhodnými funkčnými vlastnosťami pre aplikáciu v (opto)elektronike a cenné poznatky o vzťahu medzi štruktúrou pripravených derivátov a ich vlastnosťami. Organický polom riadený tranzistor (OFET) na báze naftalénového derivátu s hexylbitiofénovými ramienkami naviazanými v polohách 2 a 6 dosiahol pohyblivosť dier až $0,34 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Svetlovyžarujúca dióda (OLED) s týmto derivátom ako dierovodivým materiálom dosiahla až 2,5-násobnú svietivosť oproti OLED s bežne používaným α -NPD. Alternáciou alkylových reťazcov na bitiofénovom ramienku bol nájdený rozpustný analóg tohto derivátu, vhodný na depozíciu z roztoku, pri stále zaujímavej pohyblivosti dier v OFET. Variácia kondenzovaných aromatických jadier, polôh naviazania elektroaktívnych substituentov a mostíkov pre ich naviazanie ukázala, že vysoká miera konjugácie v rámci molekúl je nevyhnutnou podmienkou dobrých polovodičových vlastností, avšak významnú úlohu hrá ukladanie molekúl v tuhej fáze, ovplyvňované tiež symetriou molekúl. Solárne články na báze push-pull derivátov pozostávajúcich z kyanoakrylátového akceptora, benzotiazolového jadra a triarylamínového donora, dosiahli účinnosť do 3,8%. Originálne push-pull systémy na báze benzoditiazolov preukázali potenciál výrazných nelineárno-optických vlastností a zároveň, spolu s inovatívnymi tiazolovými ftalokyanínmi vykazovali dlhovlnnú emisiu žiarenia (nad 700 nm), zaujímavú pre ich potenciálne uplatnenie v fotodynamicknej terapii. Prínosom projektu bolo tiež rozpracovanie efektívnych syntetických metód pre prípravu cielených systémov a ich prekurzorov.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The result of the project solution is a series of original structures of conjugated oligoaromatic systems with remarkable functional properties for application in (opto)electronics and valuable knowledge about the relationship between the structure of the prepared derivatives and their properties. An organic field-effect transistor (OFET) based on a naphthalene derivative with

hexylbithiophene arms attached at positions 2 and 6 has reached hole mobility of 0.34 cm² of V⁻¹ s⁻¹. A light-emitting diode (OLED) with this derivative as a hole-conducting material exhibited 2.5 times higher brightness compared to an OLED with commonly used α -NPD. By altering the alkyl chains on the bithiophene arm, a soluble analogue of this derivative, suitable for deposition from the solution, has been found with the still interesting hole mobility in OFET. Variation of the fused aromatic cores, positions for attachment of electroactive substituents and linkers for their binding has shown that a high degree of conjugation within molecules is a necessary condition for good semiconductor properties, but molecular packing in solid phase that is also influenced by symmetry of molecules, plays an important role. Solar cells based on push-pull derivatives consisting of a cyanoacrylate acceptor, a benzothiazole core and a triarylamine donor, achieved an efficiency up to 3.8%. Original benzodithiazole-based push-pull systems have demonstrated the potential for remarkable nonlinear-optical properties and, along with innovative thiazole phthalocyanines, exhibited long-wave light emission (over 700 nm), interesting for their potential use in photodynamic therapy. The benefit of the project was also the development of effective synthetic methods for the preparation of target systems and their precursors.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

doc. RNDr. Martin Putala, PhD.

V Bratislave 17. 10. 2017

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. RNDr. Karol Mičieta, PhD.

V Bratislave 18. 10. 2017

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu