

Streszczenie rozprawy doktorskiej

mgr Agata Szłapa-Kula

Promotor: prof. dr hab. inż. Stanisław Krompiec

pt. „*Reakcje sprzęgania, cykloaddycji i kondensacji w syntezie nowych materiałów na potrzeby organicznej elektroniki*”

Problemem badawczym podjętym w rozprawie doktorskiej była synteza nowych pochodnych acetyleny, benzenu, naftalenu, a także pirydyny oraz zbadanie ich właściwości elektrochemicznych. Ponadto wyniki badań elektrochemicznych zostały poszerzone o obliczenia DFT, w celu lepszego zrozumienia zależności pomiędzy budową zsyntezowanych pochodnych, a ich właściwościami. Ważny aspekt badań stanowiła również weryfikacja czy otrzymane związki chemiczne mogą być zastosowane jako materiały emisyjne w dioda OLED.

Pierwszy etap pracy doktorskiej polegał na opracowaniu metod otrzymywania, oczyszczania, a także na potwierdzeniu budowy założonych pochodnych. Zaplanowane cząsteczki zostały zsyntezowane na drodze reakcji sprzęgania Sonogashiry, cykloaddycji Dielsa-Aldera [4+2], jak również kondensacji. Budowę otrzymanych związków potwierdzono za pomocą metod spektroskopowych: ^1H i ^{13}C NMR (dla wybranych pochodnych ^1H - ^1H COSY, ^1H - ^{13}C HMQC i ^1H - ^{13}C HMBC), HRMS lub analizy elementarnej. W przypadku związków chemicznych zsyntezowanych w postaci ciał stałych wykonano pomiary temperatury topnienia.

W drugim etapie rozprawy doktorskiej otrzymane cząsteczki zostały poddane badaniom elektrochemicznym metodą woltamperometrii cyklicznej (CV) oraz różnicowej pulsowej woltamperometrii (DPV). Wykonane pomiary pozwoliły na wyznaczenie wartości utleniania i redukcji, dzięki którym obliczono wartości HOMO, LUMO oraz przerwy energetycznej. Dodatkowo w celu lepszego zrozumienia otrzymanych wyników porównano je z obliczeniami DFT. Finalnie, dla wybranych związków przeprowadzono szczegółowe badania pod kątem zastosowania ich w organicznych diodach elektroluminescencyjnych (OLED). Wymienione wyżej badania pozwoliły na określenie podstawowych właściwości otrzymanych materiałów, determinujących możliwość ich praktycznego zastosowania.