

Naujų enaminų, gautų iš anilino darinių, krūvio pernašos savybės

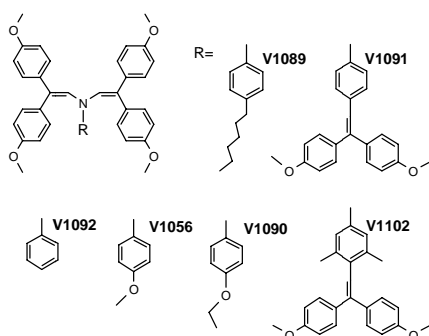
Charge transport properties of novel aniline-based enamines

Juozas Getautis¹, Deimantė Vaitukaitytė², Egidijus Kamarauskas¹, Artiom Magomedov²,
Vytautas Getautis², Vygintas Jankauskas¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

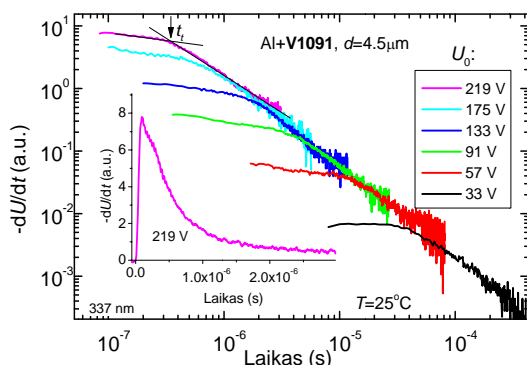
²Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, LT-50254 Kaunas
juozasget@gmail.com

Saulės celių kūrimo srityje naudojant organinių puslaidininkių Spiro-OMeTAD, jau yra pasiekti neblogi rezultatai. Tačiau ši medžiaga yra itin brangi, jos sintezė sudėtinga, o išeiga nedidelė ir siekia tik 40 % [1]. Todėl ieškoma naujų efektyvesnių junginių. Anilino, 4-metoksi(etoksi, heksil)- bei 3,5-dimetilanilino vienos pakopos reakcijose su 2,2-bis(4-metoksifenil)acetaldehidu buvo susintetinti nauji enaminais su įvairiais pakaitais (1 pav.), kurie darė stiprią įtaką tiek jonizacijos potencialui, kuris kito nuo 5,04 iki 5,34 eV, tiek ir skylių dreifiniam judriui.



1 pav. Naujų organinių puslaidininkių struktūros

Krūvininkų pernaša tirta šių darinių 3-5 μm storio sluoksniuose. Judrios yra skylės ir visoms medžiagoms jų TOF signalas yra palyginti mažai dispersiškas, todėl galėjome patikimai nustatyti skylių lėkio trukmes (2 pav.).

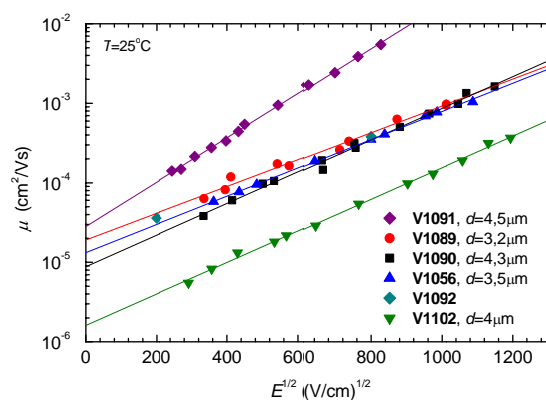


2 pav. Tipiški lėkio trukmės matavimo signalai

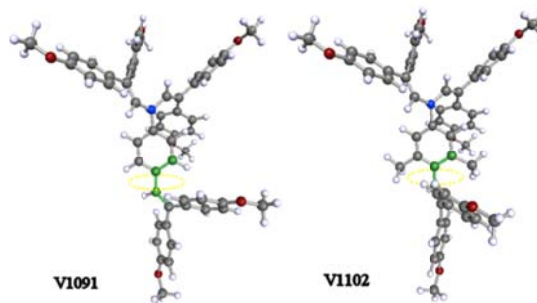
3 pav. pateikiamos naujų enaminų skylių dreifinio judrio priklausomybės nuo elektrinio lauko stiprio. Geriausias judris yra stebimas **V1091** medžiagoje ($5 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{Vs}$, esant $6,4 \cdot 10^{-5} \text{ V/cm}$ elektrinio lauko stipriui). Aukštas skylių judris šioje medžiagoje gali būti

aiškinamas didžiausia π -konjuguota molekule. Labai panašios struktūros junginyje **V1102** išmatuotas mažiausias krūvininkų judris. Matomai, prie benzeno žiedo prijungus dvi metilo grupes dėl erdvinio trukdžių molekulės struktūra pasidaro mažiau palanki krūvio pernašai. Skaičiavimai, optimizuojant struktūras DFT B3-LYP metodu, parodė, kad kampas tarp benzeno žiedo ir dvigubos jungties **V1091** junginio atveju yra $24,6^\circ$, o **V1102** junginio atveju jis padidėja iki $58,6^\circ$ (4 pav.). Taigi, dėl to ženkliai pablogėja π -konjugacija tarp šių molekulės dalių. Tuo galime paaiškinti žymų skylių judrio sumažėjimą **V1102** junginyje (3 pav.).

Visumoje šie junginiai pasižymi gera skylių pernaša bei energetiniais lygmenimis tinkamais naudojimui dažais pajautrintose saulės celėse.



3 pav. Skylių dreifinio judrio priklausomybės nuo elektrinio lauko stiprio naujuose enaminiuose



4 pav. Junginių **V1091** ir **V1102** erdvinės struktūros

Reikšminiai žodžiai: organinis puslaidininkis, skylių judris, jonizacijos potencialas, π -konjugacija.

Literatūra

[1] K. Rakstys et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, 7464 (2016).