

Trinarių trifenilamino fragmentą turinčių junginių sužadintos būsenos dinamika

Excited state dynamics of trinary star-shaped triphenylamine based compounds

Domantas Peckus¹, Tomas Matulaitis², Jūratė Simokaitienė², Tomas Tamulevičius¹, Viktorija Mimaitė², D. Volyniuk², Marius Franckevičius³, Vidmantas Gulbinas³, Sigitas Tamulevičius¹, Juozas Vidas Gražulevičius²

¹Medžiagų mokslo institutas, Kauno technologijos universitetas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

²Polimerų chemijos ir technologijos katedra, Kauno technologijos universitetas, K. Baršausko g. 59, LT-51423 Kaunas

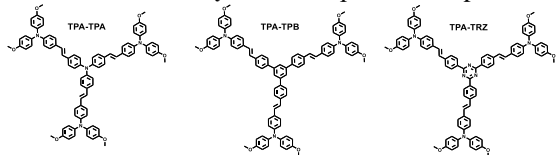
³Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio pr. 3, 10257 Vilnius

domantas.peckus@ktu.lt

Elektrono pernašos procesas ir jį lydintis organinių molekulių fragmentų, kurie susideda iš donorinių (D) ir akceptorinių (A) grupių, sukimasis yra vadinamas sukimine vidumolekuline krūvio pernaša (angl. „*Twisted Intramolecular Charge Transfer*“, toliau TICT). Šis reiškinys yra įdomus dėl plačių panaudojimo galimybių jutikliuose, fotojungikliuose, organiniuose saulės šviesos dioduose, saulės šviesos elementuose [1, 2].

Šiame darbe mes pristatome trijų naujų žvaigždės tipo junginių, turinčių skirtingų elektrono akceptorinių savybių branduolius, kurie yra sujungti dvigubomis jungtimis su trifenilamino (TPA) šoninėmis grupėmis, sintezę ir detalius tyrimus. Šiame darbe buvo ištirta junginio branduolio įtaka terminėms, optinėms, fotofizikinėms ir TICT susidarymo savybėms. Trifenilamino dariniai buvo detaliam tirti nuostoviosios ir laikinės spektroskopijos metodais, siekiant išsiaiškinti sužadintos būsenos formavimosi ir relaksacijos procesus. Nuostovioji sugertis buvo išmatuota su UV-VIS-NIR spektrometru, o ultraspartūs procesai - skirtuminės sugerties spektrometru HARPIA (Šviesos konversija). Ultrasparčių procesų matavimams buvo naudotas Yb:KGW lazeris Pharos (Šviesos konversija), kuris generuoja 200 kHz pasikartojimo, 290 fs trukmės, 1030 nm bangos ilgio impulsus. Norimas žadinimo bangos ilgis buvo parenkamas kolineariu optiniu parametriniu stiprintuvu Orpheus ir harmonikų generatoriumi Lyra (Šviesos konversija). Baltos šviesos generavimui buvo naudotas safyro kristalas, kuris buvo veikiamas 1030 nm bangos ilgio spinduliu. Nuostovioji ir dinaminė fluorescencija buvo matuota Edinburgh instruments FLS980 ir Streak-camera Hamamatsu C5680 spektrometrais.

Trifenilamino darinių struktūros pateiktos 1 pav.

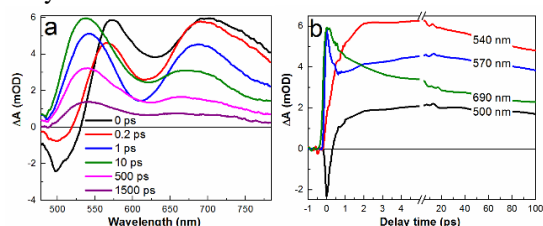


1 pav. Žvaigždės formos trifenilamino dariniai.

Tiriami bandiniai buvo ištirpinti įvairiuose poliniuose (tetrahidrofuranas (THF)) ir nepoliniuose (toluenas) tirpikliuose.

TICT procesas TPA junginiuose buvo tirtas pasitelkiant dinaminės fluorescencijos ir skirtuminės sugerties metodus. TICT pernaša buvo stebima Streak-camera ir skirtiminiu sugerties spektrometru.

Skirtuminės sugerties spektrometras dėl savo geriausios laikinės skyros pateikė daugiausia informacijos apie TICT procesus TPA molekulėse. Tyrimai rodo, kad efektyviausiai TICT procesas vyksta TPA-TRZ junginyje (2 pav.). Greitas neigiamo skirtuminės sugerties signalo gesimas ties 500 nm ir teigiamo signalo augimas ties 540 nm rodo naujos būsenos formavimąsi, kaip kad rodo fluorescencijos matavimai bei teorinis molekulių orbitalių modeliavimas. Šią naujai atsirandančią būseną galime priskirti prie TICT susidarymo.



2 pav. Skirtuminės sugerties spektrai (a) ir kinetikos (b) TPA-TRZ bandinio THF tirpale. Bandinys buvo sužadintas 435 nm bangos ilgio spinduliuote.

Dendrimerinų junginių išsami analizė parodė, kad TPA-TRZ junginys susideda iš stiprių elektrono donorinių ir akceptorinių dalių. TPA-TPA susideda tik iš donorinių dalių, o TPA-TPB susideda iš stiprių donorinių ir silpnos akceptorinės dalies.

Reikšminiai žodžiai: sukiminė vidumolekulinė krūvio pernaša, solvatochromizmas, skirtuminė sugertis, laikinė fluorescencija, D-A sistema.

Literatūra

- [1] S. Sasaki, G.P.C. Drummen and G. I. Konishi, *J. Mater. Chem. C* **4**, 2731 (2016).
- [2] H. Zhu, M. Li, J. Hu, X. Wang, J. Jie, Q. Guo, C. Chen and A. Xia, *Sci. Rep.* **6**, 24313 (2016).