



I E G U L D Ī J U M S T A V Ā N Ā K O T N Ē

**Project title:** Design and Investigation of Light Emitting and Solution Processable Organic Molecular Glasses

**Number of project implementation agreement:** 1.1.1.1/16/A/131

**Registration number:** 2585/2017

**Project completed during the period 01.10.2019. - 30.12.2019.:**

### 1. darbība

Uz sākotnējo kvantu ķīmisko aprēķinu bāzes tika identificēti potenciāli no tripleta ierosinātā stāvokļa izspīdoši purīna atvasinājumi, kas satur purīna akceptoru un karbazola donoro fragmentu. Pēc savienojumu sintēzes un to fotofizikālo īpašību padziļinātas izpētes tika secināts, ka tiem piemīt termiski aktivētās aizturētās fluorescences (TADF) īpašības. Atšķirībā no klasiskām TADF sistēmām, kuras veido konjugēti donora-akceptora molekulārie fragmenti, iegūtie purīna atvasinājumi uzskatāmi par eksipleksa tipa emiteriem, kuros neīstenojas iekšmolekulārais lādiņu pārnese process caur kovalenti saistītām ķīmiskajām saitēm. Tas piešķir pētītajiem savienojumiem virkni praktiskajam pielietojumam būtisku īpašību: mazu starpību starp singleta un tripleta enerģētiskajiem līmeņiem un izrietošu pazeminātu emisijas dzīveslaiku. Analógiskas emisijas īpašības tika konstatētas fizikālām purīna akceptora un karbazola donora maisījumam, apstriprinot eksipleksa tipa TADF emisijas īstenošanos. Pētījuma rezultāti apkopoti publikācijas manuskriptā, kas iesniegts žurnālā Chemical Communications.

### 2. darbība

Sintezēti jauni 5-(alkil/ariltio)tetrazolo[1,5-a] hinazolīna atvasinājumi, pētīts to azīda-tetrazola līdzsvars un veiktās tālākās CuAAC reakcijas ar dažādiem alkīniem, lai iegūtu triazolilatvasinājumus hinazolīnu sērijā. Veikta savienojumu raksturošana atbilstoši SCI žurnāla prasībām. Tika turpināts darbs arī pie karbazola-purīna analoģu iegūšanas ar uzlabotām fluorescentām īpašībām. Pētījuma rezultāti hinazolīnu sērija apkopoti manuskriptā "Application of azide-tetrazole tautomerism in the synthesis of thiosubstituted tetrazoloquinazolines", kas iesniegts European Journal of Organic Chemistry.

### 3. darbība

Izveidoti vairākas baltās gaismas OLED struktūras, mainot zilo un dzeltenu emiteru attiecību un saimnieka materiālu. No izveidotiem OLEDiem labākais bija ar parametriem: 100 cd/m<sup>2</sup>, 0.28 cd/A, 0.21 lm/W, 3.7V un CIE x=0.34 y=0.40. Papildus tika izveidoti OLED ar TADF purīnu atvasinājumiem kā neatšķaidītu plānas kārtiņas emiteri. Izveidotā struktūra bija ITO/PEDOT:PSS(50nm)/TADF emiteris(45nm)/TPBi(20nm)/LiF(1nm)/Al. Emitētā krāsa bija zilgana (CIE x=0.27-0.28 y=0.39-0.41) ar augstāko spilgtumu 110 cd/m<sup>2</sup>, strāvas efektivitāti 0,25cd/A, jaudas efektivitāti 0,11 lm/W un ieslēgšanās spriegumu 6.3V. Otrs emiteris izstaroja zaļgandzeltenu krāsu ar CIE koordinātēm x=0.41 y=0.51, spilgtumu 70 cd/m<sup>2</sup>, maksimālās efektivitātes 0.012cd/A, 0,006 lm/W un ieslēgšanās spriegumu 4V. Iepriekš veiktie pētījumi par heteroleptisku zaļu krāsu emitējošu irīdija kompleksu pielietojumu un stērisko grupu ietekmi uz OLED veikspēju apkopoti publikācijas manuskriptā, kas iesniegts žurnālā Physical Chemistry Chemical Physics.

Design and Investigation of Light Emitting and Solution Processable Organic Molecular Glasses 01.10.2019.-30.12.2019. | Riga Technical University  
<https://www.rtu.lv/en/university/rtu-projects/open-publicity/528>