

Skersaryšintų arilpakeistų fluoreno darinių krūvio pernašos savybės

Charge transport properties in crosslinked aryl-substituted fluorene derivatives

Egidijus Kamarauskas¹, Aistė Jegorovė², Marytė Daškevičienė², Vytautas Getautis², Kristijonas Genevičius¹, Vygintas Jankauskas¹

¹Vilniaus Universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, Vilnius 10257

²Kauno technologijos universitetas, Cheminės technologijos fakultetas, Radvilėnų pl. 19, Kaunas 50254
egidijus.kamarauskas@ff.vu.lt

Pastaruoju metu mažamolekulinės organinės krūvio pernašos medžiagos yra pastovaus dėmesio centre dėl galimybės organines medžiagas pritaikyti saulės elementuose, fotodetektoriuose, tranzistoriuose, lanksioje elektronikoje, *etc.* Tačiau kartu šios organinės medžiagos pasižymi mažu atsparumu aplinkos sąlygoms, ypač deguonies ir vandens įtakai, taipogi mechaniniam poveikiui.

Siekiant padidinti organinių krūvio pernašos medžiagų tiek mechaninį atsparumą, tiek atsparumą aplinkos sąlygoms, taikomos įvairios technikos – nuo paprasčiausio izoliavimo apsauginiu sluoksniu iki bandymų skersaryšinti, kai medžiagos molekulės sudaro tarpusavyje papildomus ryšius (dažnai aukštoje temperatūroje), ir dėl tokių ryšių medžiagos sluoksnis tampa mechaniškai tvirtesnis, labiau atsparus aplinkos (deguonies ir vandens) poveikiui.

Tačiau įprastai skersaryšinimas vyksta aukštoje temperatūroje (>200°C), tad terminio proceso metu gali būti suardyti kiti sluoksniai (pvz. perovskitinės struktūros suyra 150°C temperatūroje), ir tai yra ribojantis veiksnys.

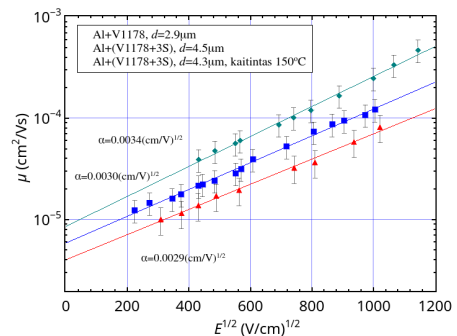
Vienas galimų sprendimų yra naudoti cheminius iniciatorius, kurie skersaryšinimo procesą inicijuoja esant daug žemesnėms temperatūroms. Visgi tai yra papildomas cheminis priedas, kuris daro įtaką gauto sluoksnio laidumui, krūvio pernašos procesams.

Šiame darbe mes sutelkėme dėmesį būtent į skersaryšimo iniciatorių įtakos krūvio pernašai nustatymui, tyrimams panaudodami organinius krūvių transportuojančius sluoksnius, pagamintus iš fluoreno darinių, turinčių dvi stireno funkcines grupes. Yra žinomas fluoreno darinys **V1145**, aprašytas [1]. Pagal diferencinės skenuojančios kalorimetrijos (DSK) tyrimus jo skersaryšinimo reakcija vyksta 190°C temperatūroje. Mūsų susintetintas darinys **V1178** su metilgrupėmis termiškai skersaryšinasi dar aukštesnėje – 220°C temperatūroje. Nors gaunami atsparūs skersaryšinti sluoksniai, gerai pernešantys skyles, bet dėl palyginti aukštų skersaryšinimo temperatūrų šių junginių panaudojimas organinėse neinvertuotose saulės celėse yra ribotas, nes neįmanoma suderinti su perovskitiniais sluoksniais dėl šių sluoksnių terminio atsparumo.

Mes tyrėme, kaip galima sumažinti skersaryšinimo temperatūrą. Vienas iš tokių būdų yra 4,4'-tiobisbenzentiolio panaudojimas, kurį čia žymime **3S**. DSK tyrimai parodė, kad skersaryšinimo temperatūra

ženkliai sumažėja, pvz., **V1178** skersaryšinimo temperatūra sumažėja iki 140°C.

Tyrėme, kokie vyksta krūvio pernašos savybių pokyčiai skersaryšinant **V1145** ir **V1178** su 4,4'-tiobisbenzentioliu, maišant moliniu santykiu 1:1. Tyrimams naudojome XTOF metodą. Matavimai parodė, kad neskersaryšintame medžiagų mišinyje kiek išauga skylių pernašos dispersiškumas bei sumažėja jų judris. Atlikus skersaryšinimą pakaitinant stebimi tolesni krūvio pernašos pokyčiai. **V1178** tie pokyčiai yra neįžymūs, kai **V1145** atveju labai stipriai išauga krūvio pernašos dispersiškumas, dėl kurio silpnesniuose elektriniuose laukuose judris tampa neišmatuojamu bei labai stipriai išauga judrio priklausomybė nuo elektrinio lauko stiprio. Dėl tokios priklausomybės šio darinio panaudojimas saulės celėse būtų netikslingas. Tuo tarpu **V1178** darinyje skylių judris silpnuose elektriniuose laukuose lieka pakankamai aukštas (1 pav.). Matome, kad papildomų metilgrupių buvimas **V1178** molekulėje duoda teigiamą įtaką ją skersaryšinant su tiobisbenzentioliu. Gauti sluoksniai gali būti panaudoti saulės celėse.



1 pav. Skylių judrio μ priklausomybė nuo elektrinio lauko E grynoje, su priedu ir skersaryšintoje su priedu medžiagoje **V1178**.

Reikšminiai žodžiai: judris, skersaryšinimas, XTOF.

Literatūra

- [1] Yun Zhang, Chun Kou, Junjie Zhang, Yahui Liu, Wenhua Li, Zhishan Bo and Ming Shao. *Crosslinked and dopant free hole transport materials for efficient and stable planar perovskite solar cells.* J. Mater. Chem. A, 2019, 7, 5522.