



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ A SPOTŘEBNÍ CHEMIE

INSTITUTE OF PHYSICAL AND APPLIED CHEMISTRY

SYNTÉZA A FUNKCIONALIZACE DERIVÁTŮ DIKETOPYRROLOPYRROLŮ PRO ORGANICKOU ELEKTRONIKU

THE SYNTHESIS AND FUNCTIONALIZATION OF DIKETOPYRROLOPYRROLE DERIVATIVES FOR ORGANIC ELECTRONICS

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Kamil Mamleev

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D.

BRNO 2018

Zadání bakalářské práce

Číslo práce: FCH-BAK1210/2017
Ústav: Ústav fyzikální a spotřební chemie
Student: **Kamil Mamleev**
Studijní program: Chemie a chemické technologie
Studijní obor: Chemie pro medicínské aplikace
Vedoucí práce: **doc. Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D.**
Akademický rok: 2017/18

Název bakalářské práce:

Syntéza a funkcionalizace derivátů diketopyrrolopyrrolů pro organickou elektroniku

Zadání bakalářské práce:

Cílem práce je vypracování literární rešerše pro zvolenou problematiku a rozpracování základních syntetických procedur pro dané téma.

Termín odevzdání bakalářské práce: 21.5.2018

Bakalářská práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí bakalářské práce.

Kamil Mamleev
student(ka)

doc. Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D.
vedoucí práce

prof. Ing. Miloslav Pekař, CSc.
vedoucí ústavu

V Brně dne 31.1.2018

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
děkan

ABSTRAKT

Organická elektronika je dnes perspektivním směrem vědy. Díky řadě výhod mohou materiály na bázi organických látek nahradit existující anorganické materiály v analogických zařízeních jako jsou Organic solar cell, OLED, OFET, Biosensory atd. V teoretické části bakalářské práce jde o recenzi molekul diketopyrrolopyrrolu (DPP) a dithioketopyrrolopyrrolu (DTPP) a jejich derivátů. Provádí se přehled syntézy a vlastností derivátů těchto molekul. Jsou uvedeny příklady použití DPP a DTPP v různých oblastech organické elektroniky.

V experimentální části bakalářské práce jde o popis syntézy struktur DTPP s thiofenovými a fenylovými substituty. Také je ukázána modifikace thiofenového DTPP pomocí S'S, alkylace. Syntetizované produkty byly čištěny pomocí silikagelové kolonové chromatografie. Struktury těchto molekul byly potvrzeny pomocí 1H NMR spektroskopie.

ABSTRACT

Nowadays, organic electronics is a promising field of science. Because of a number of advantages, materials based on organic substances can replace existing inorganic analogues in such devices as organic solar cells, OLED, OFET, biosensors, etc. In the theoretical part of the bachelor's thesis, the molecules of diketopyrrolopyrrole (DPP), dithioketopyrrolopyrrole (DTPP), and their derivatives were fully reviewed. An overview of the synthesis and the properties of the derivatives of these molecules was given. Possible applications of DPP and DTPP in various areas of organic electronics were provided.

The experimental part of the bachelor's thesis described the synthesis of DTPP structures with thiophene and phenyl substituents. In addition, a modification of thiophene DTPP with S'S alkylation was demonstrated. All synthesized compounds were purified by silica gel column chromatography. The structures of the obtained products were characterized by 1H NMR spectroscopy.

KLÍČOVÁ SLOVA

Diketopyrrolopyrrol, Dithioketopyrrolopyrrol, Organická elektronika, Alkylace

KEWORDS

Diketopyrrolopyrrole, Dithioketopyrrolopyrrole, Organic electronics, Alkylation

MAMLEEV, K. *Syntéza a funkcionalizace derivátů diketopyrrolopyrrolů pro organickou elektroniku*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2018. 41 s. Vedoucí bakalářské práce doc. Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracoval samostatně a že všechny použité literární zdroje jsem správně a úplně citoval. Bakalářská práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího bakalářské práce a děkana FCH VUT.

.....

podpis studenta

Poděkování:

Rád bych poděkoval vedoucímu bakalářské práce doc. Ing. Jozefu Krajčovičovi, Ph.D. a konzultantovi Ing. Martinu Cigánkovi za cenné rady, věcné připomínky a vstřícnost při konzultacích a vypracování této práce. Děkuji také Fakultě chemické za vytvoření pracovních podmínek, bez nichž by nebylo možné realizovat experimentální část.

OBSAH

ABSTRAKT	3
ABSTRACT	3
KLÍČOVÁ SLOVA	3
KEywords	3
OBSAH	5
CÍL PRÁCE.....	7
1. ÚVOD.....	8
2. TEORETICKÁ ČÁST	9
2.1. Diketopyrrolopyrrol.....	9
2.1.1. Vlastnosti DPP derivátů	9
2.2. Organická fotovoltaika	10
2.2.1. Použití DPP pro tvorbu molekul elektron-donorů.....	10
2.2.2. Použití DPP pro vytvoření molekul elektron-akceptorů.....	14
2.3. Biosensory	18
2.4. Organické polem řízené tranzistory	19
2.5. Organická světlo emitující dioda	21
2.6. Dithioketopyrrolopyrrol.....	22
2.6.1. Syntéza DTPP.....	22
2.6.2. Deriváty DTPP	23
2.7. Separační a analytické metody.....	25
2.7.1. Chromatografie na tenké vrstvě.....	26
2.7.2. Kolonová kapalinová chromatografie.....	26
2.7.3. Nukleární magnetická rezonance.....	26
3. EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST	28
3.1. Chemikalie	28
3.2. Seznam použitých přístrojů a analytických technik	28
3.3. Příprava derivátu DPP B/4091	29
3.4. Příprava derivátu DPP B/4096.....	30
3.5. Příprava derivátu DPP B/5057.....	31
4. VÝSLEDKY A DISKUZE	32
5. Závěr.....	33
6. SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ.....	34

7.	SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ	37
8.	SEZNAM PŘÍLOH	38
8.1.	Seznam sloučenin	38
8.2.	Naměřená NMR spektra	39
8.3.	Termogravimetrická analýza připravených derivátů DPP.....	40

CÍL PRÁCE

V této bakalářské práci jsou dvě části. Cílem první, teoretické části je shrnout aktuální informace o molekulách diketopyrrolopyrrolů (DPP) a dithioketopyrrolopyrrolů (DTPP) a jejich využití v oblastech organické elektroniky. Druhá, experimentální část má za cíl syntézu klíčových intermediátů pro přípravu nové série *S,S'*-substituovaných dithioketopyrrolopyrrolů (DTPP).

1. ÚVOD

V dnešní době se elektronické technologie používají ve všech aspektech našeho života: zdravotní péči, náš domácí život, národní a státní bezpečnost atd. Potřeby lidstva v oblasti zboží a služeb každým rokem stále více rostou, a proto vzniká větší požadavek na nová elektronická zařízení. Nicméně, hlavní otázkou je, jaký vliv má celý životní cyklus elektronických zařízení na životní prostředí. Cyklus zahrnuje výrobu, používání a likvidaci těchto zařízení. Proto mohou být řešením tohoto problému organická elektronická zařízení, která umožňují nízkonákladovou výrobu a následnou ekologickou likvidaci. Právě tyto elektronické struktury v organických zařízeních mohou poskytovat jedinečné vlastnosti, ale také odhalit nové možnosti. Tento směr výzkumu je velmi inovativní, ekologičtější a velmi perspektivní pro studium chemického odvětví, fyziků, inženýrů a jiných vědců [1][2].

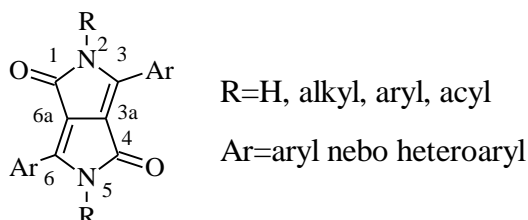
Dnes existují čtyři hlavní zaměření organické elektroniky. Displeje a osvětlení, organické tranzistory, solární panely a biosensory. Je to neúplný soupis, použití organických složek by mělo být rozšířeno. Materiály používané k vytváření materiálů pro organická elektronická zařízení mohou být malé molekuly nebo polymery. Jedním z takových každodenních využití organické elektroniky, které můžeme dnes pozorovat, jsou OLED displeje našich chytrých telefonů nebo na televizních obrazovkách. Zařízení s organickými materiály mohou být flexibilní, měkké a roztavitelné čehož není možné dosáhnout anorganickými materiály. Například různé displeje, které je možné složit nebo skladovat v rolích. Organické solární články již nacházejí uplatnění, instalují je na střechách afrických vesnic, u kterých není úniku ke standardnímu zdroji elektrické energie. Tranzistory mají ve srovnání s anorganickými analogy jedinečné vlastnosti. Metodika vytvoření OFET může spouštět integrovaný systém na plastech, nebo na jiných flexibilních strukturách. Vědci používají architekturu na základě OFET proto, aby tvořili materiály které mají podobnou strukturu jako lidská kůže. Tyto materiály přijímají signály zvenčí a mění jejich informace [3].

V mé práci se zaměříme na molekuly diketopyrrolopyrrolu (DPP), které řadí mezi významné organické pigmenty. Své využití nacházejí v pestré škále elektronických zařízení. V některých odvětvích jsou více studovány než v jiných. Díky své jednoduché syntéze, dobré stabilitě a intenzivní barevnosti DPP přitáhly pozornost mnoha vědců. Vzhledem k tomu, že molekula může být přeměněna v různé formy díky přidání substituentů, změně substituentů a také transformaci malých molekul na základě DPP v polymery, otevírá obrovské perspektivy pro vědecké studie. V nedávné době bylo publikováno velké množství vědeckých prací o různých derivátech DPP a využití těchto derivátů v průmyslu [4].

2. TEORETICKÁ ČÁST

2.1. Diketopyrrolopyrrol

Diketopyrrolopyrrol (DPP), systematickým názvem 2,5-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrrol-1,4-dion, má planární strukturu obsahující konjugovaný systém π -elektronů skládající se ze dvou pětičlenných kruhů, obsahujících laktamové skupiny. DPP patří do skupiny organických pigmentů. Na obrázku č 1 je uvedena základní struktura molekuly DPP [5].



Obrázek 1 Molekula DPP

Dnes existuje několik syntetických přístupů pro tvorbu molekuly DPP. Nicméně se v průmyslu nejčastěji používá reakce, kdy interaguje aromatický nitril s dialkylsukcinátem. (Schéma 1) [6].

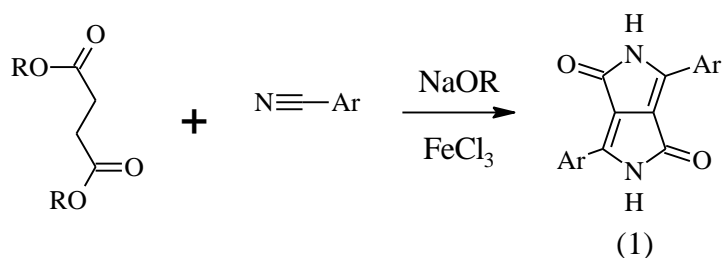
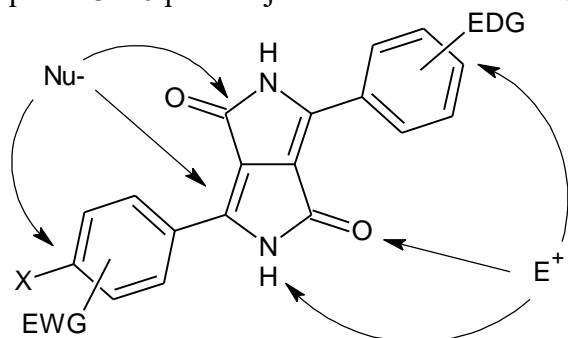


Schéma 1 Syntéza molekuly DPP

Na molekule DPP je několik reakčních center. Kyslík a dusík na laktamové skupině, dvojné vazby v centru a také aromatické kruhy v pozicích 3,6 podléhají elektrofilnímu ataku. Karbonylový uhlík, a také pozicí 3 a 6 podléhají nukleofilnímu ataku viz. Obrázek č 2 [5].



Obrázek 2 Reakční centry molekuly DPP

2.1.1. Vlastnosti DPP derivátů

Molekuly DPP mají celou řadu užitečných vlastností. Je to například možnost velkého počtu syntetických modifikací díky tomu, že molekula DPP má velké množství reakčních center,

viz. Obrázek č 2. Materiály na bázi molekuly DPP mají silnou fluorescenci, vysokou tepelnou a foto stabilitu. Díky těmto vlastnostem, má dnes DPP velký potenciál pro tvorbu organických elektronických zařízení. DPP je zástupcem vysoce výkonných pigmentů. Většinou jsou to polycyklické organické pigmenty. Vysoce výkonné pigmenty mají na rozdíl od klasických organických pigmentů schopnosti účastnit se přenosu náboje díky přítomnosti konjugace dvojných vazeb ale také díky přítomnosti volných nábojů. Dnes v průmyslu DPP se používá jako vysoce výkonné pigmenty nebo polovodiče v organické elektronice. V poslední době jsou materiály na bázi DPP studovány pro jejich použití jako elektron-donory nebo elektron-akceptory při vytváření organických solárních článků, organických biosensorů, organických tranzistorů nebo organických diod. Parametry chromoforů na bázi DPP jsou hlavně závislé na arylových nebo heteroarylových skupin, jako jsou fenyl, thiofen, thiazol atd. [6][7].

2.2. Organická fotovoltaika

Z důvodu zvýšení spotřeby energie a také v souvislosti s tím, že fosilních zdrojů Země ubývá, potřebuje lidstvo najít nové alternativní zdroje energie. Jako tyto zdroje energie musí být použity čisté a obnovitelné zdroje, jako jsou energie slunce, energie větru atd. V dnešní době je jedním z nejperspektivnějších směrů přeměna slunečního záření na elektrickou energii. Z tohoto důvodu byly vytvořeny solární panely. V posledních několika letech se dostávají do popředí moderní panely vytvořené na bázi organických materiálů OSC (*Organic Solar Cell*). OSC mají celou řadu výhod ve srovnání s anorganickými analogy. Jsou to nízké výrobní náklady, nízká hmotnost, pružnost, mobilita a jednoduchost při výrobě. Jednou z látek, která může být použita v organické elektronice, je diketopyrrolopyrrol (DPP) [8].

2.2.1. Použití DPP pro tvorbu molekul elektron-donorů

Moderní organické solární panely jsou vytvořeny podle modelu BHj (*Bulk Heterojunction*), při kterém jsou smíchány elektrony donorních a elektrony akceptorních materiálů. Účinnost těchto solárních panelů je přímo závislá na účinnosti obou typů materiálů. PCE (*Power conversion efficiency*) je hodnota, která ukazuje účinnost přeměny jednoho druhu energie v jiný. Často užitou strategií pro zvýšení hodnoty PCE je design malého donorně-akceptorového materiálu. Což můžeme udělat zavedením odpovídající elektronově-bohaté částici (donoru), stejně jako elektronově-deficitní části (akceptoru). Díky tomu mohou být energie HOMO a LUMO modifikovány a také může být změněna absorpce [9]. Jako elektron donorní materiály se používají konjugované polymery nebo malé molekuly SM (*Small Molekul*) [10].

V důsledku dřívějších výzkumů bylo zjištěno, že molekulární konjugační struktura, která obsahuje elektron-donorní a také elektron-akceptorní části, je základem pro vytvoření vysoce účinných elektron-donorů v organických solárních bateriích. Z tohoto důvodu budou dále uvedeny příklady elektron-donorních molekul, které mají podobné konjugační struktury.

SM představují větší zájem pro výrobu OSC v průmyslovém měřítku, protože mají více jasnou chemickou strukturu, ale také vyšší čistotu, což umožňuje vyrábět vysoce účinné materiály [11]. V dnešní době existuje velmi malé množství SM donorů které jsou kompatibilní s různými druhy akceptorů. To vede k tomu, že výrobě OSC v průmyslovém měřítku není věnován patřičný rozvoj. Prioritou je vytvoření SM elektron donorů, které mohou být kompatibilní s různými fullerenovými nebo nefullerenovými akceptory. Tyto

univerzální donory by měly disponovat několika důležitými parametry. Průměrný rozsah absorpce záření fullerenových akceptorů je v oblasti 400 nm a průměrný rozsah absorpce záření nefullerenových akceptorů se pohybuje kolem 600 až 800 nm, proto je třeba vytvořit materiál s absorpcí záření v oblasti 300-700 nm. Dalším důležitým parametrem je to, že u materiálu molekulární orbitály HOMO a LUMO by měly být vyšší než u akceptorů. Posledním důležitým parametrem pro vytvoření univerzálního donoru je vytvoření struktury molekuly tak, aby se zvýšil intramolekulární přenos náboje mezi donorem a akceptorem, pro zvýšení účinnosti absorpce záření. Pro objevování nových syntetizovaných typů donorů se nejčastěji používají fullerénové deriváty jako akceptory [10].

Velký vliv na vlastnosti DPP chromoforů mají různé arylové nebo heteroarylové skupiny které připojené k jádru molekuly DPP, jako fenylová, thiofenová nebo thiazolová skupiny [7].

V roce 2015 se Lee a kol.[7] snažili zlepšit optické a elektrochemické vlastnosti malých molekul na základě DPP, aby byly vhodnějšími elektron-donory s více sníženou band gap pro jejich použití v solárních bateriích. Protože molekula DPP má silné akceptorní vlastnosti, byly použity jako jádra, na které jsou připojeny různé elektron-donorní skupiny [7].

S ohledem na tuto skutečnost, vytvořila skupina vědců dvě N,N' alkylované molekuly na základě thifenového DPP s různými elektron-donorními skupinami pro srovnání. To jsou molekuly FL-DPP-FL a TPA-DPP-TPA. Počáteční materiál N,N' alkylovaný thiofenový DPP (2) reagoval přes Suzuki-coupling reakce za katalýzy palladiem s 9H fluoro-2-yl boronovou kyselinou (3) nebo s 4-(difenylamin)fenyl boronovou kyselinou (4). Reakce probíhala v THF za přítomnosti uhličitanu draselného a také v přítomnosti $Pd(PPh_3)_4$ jako katalyzátoru. Požadované molekuly DPP vznikly ve výtěžku 42 %, resp. 51 %. Schéma syntézy těchto dvou molekul je uvedeno na schemata 2.

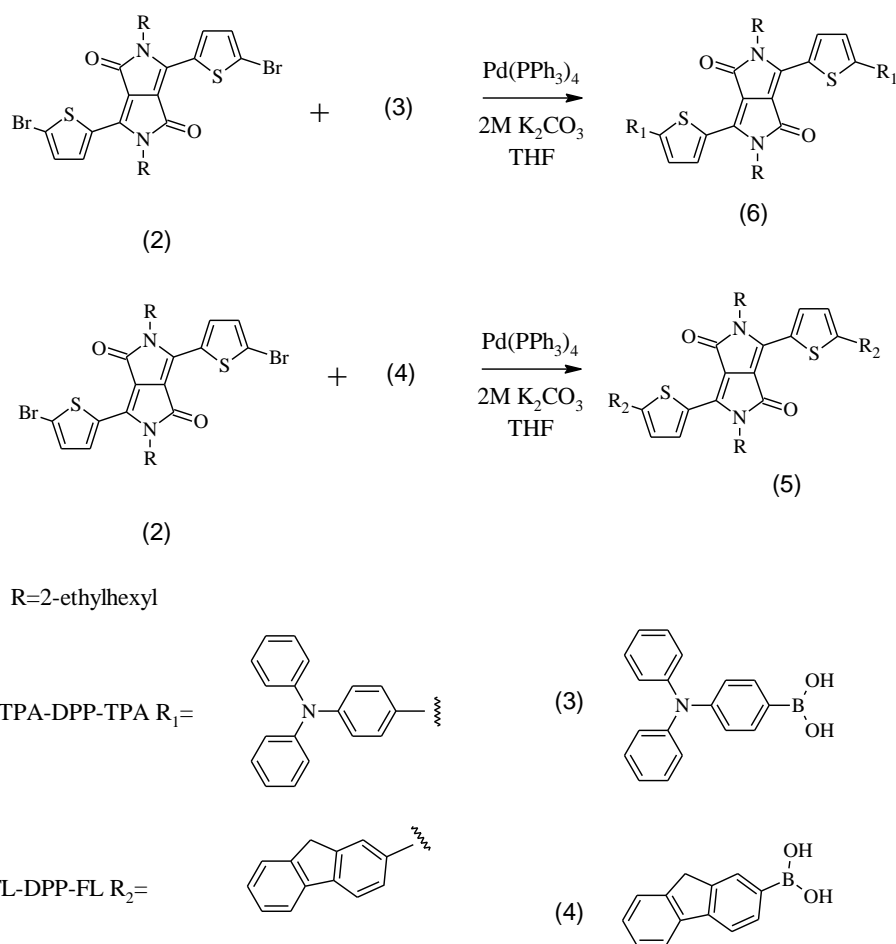


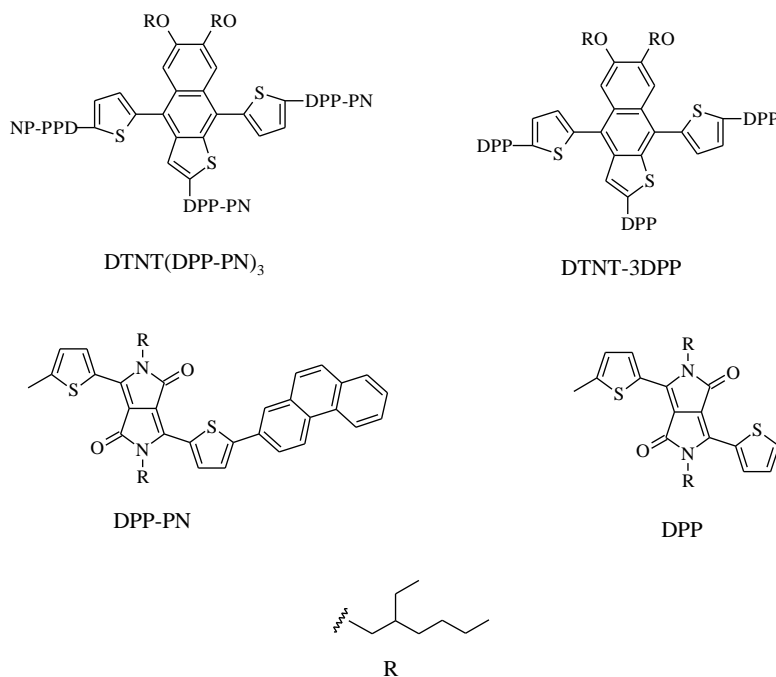
Schéma 2 Syntéza molekul FL-DPP-FL a TPA-DPP-TPA

Studium těchto molekul ukázalo vynikající rozpustnost a vysokou tepelnou stabilitu s teplotou rozkladu asi 330 °C. Hodnoty LUMO/HOMO jsou -3,13/-5,15 eV pro TPA-DPP-TPA a -3,34/-5,29 eV pro FL-DPP-FL. Obě molekuly mají poměrně stejný bandgap (1,73-1,77 eV). Organické solární články na bázi PC71BM ([6,6]-phenyl-C71-butyric acid metyl ester) jako akceptoru a připravovaných molekul jako donorů ukázaly hodnotu PCE 1,45 % resp. 1,73 %.

Díky dalšímu studiu molekul došli vědci k závěru, že u FL-DPP-FL jsou lepší hodnoty PCE, protože tato molekula vykazovala lepší morfologii. Díky tomu byla zlepšena mobilita nábojů, což vede k vyšší hodnotě PCE. Syntetizované molekuly mají stejná jádra, ale různé elektron-donorní skupiny, které mají vliv na úroveň HOMO-LUMO, ve větší míře na LUMO. Tento výzkum potvrdil jejich hypotézu o vlivu elektron-donorních skupin na vlastnosti molekul DPP [7].

Zvláštní zájem k sobě přitahují rozpustné malé organické molekuly ve tvaru hvězdy. Díky tomu, že u těchto molekul mohou být změněny funkční skupiny, donorní a akceptorové části molekuly a také konjugační most, můžeme získat malý bandgap, širokou a silnou absorpci. To má pozitivní efekt pro hodnoty PCE. Známý příklad molekuly ve tvaru hvězdy je trifenylamin. I když je tato molekula dobrým elektronovým donorem, která dává dobré hodnoty PCE, ale má významnou nevýhodu kterou je nedostatečná planárnost. Nicméně, Zhu a kol.[12] chtěli prozkoumat nové jádro pro molekuly, které mají tvar hvězd. Tato studie byla provedena s cílem najít nové elektron-donorní části s větší planárností a také potvrdit fakt, že planárnost molekuly ovlivňuje její fotovoltaické vlastnosti. Syntetizovali dvě nové

konjugované malé molekuly ve T-tvaru DTNT-3DPP a DTNT(DPP-PN)₃ viz. Obrázek č 3. Jako základ byl použit 4,9-di(thiofen-2-yl)nafto[2,3-b]thiofene (DTNT), a molekula DPP byla použita jako akceptorní část. Tyto dvě molekuly jsou syntetizovány přes reakci Stille coupling pomocí Pd(PPh₃)₄ jako katalyzátoru, kde DTNT reaguje s odpovídajícím DPP. Reakce probíhá v toluenu při teplotě 100 °C, v atmosféře argonu.

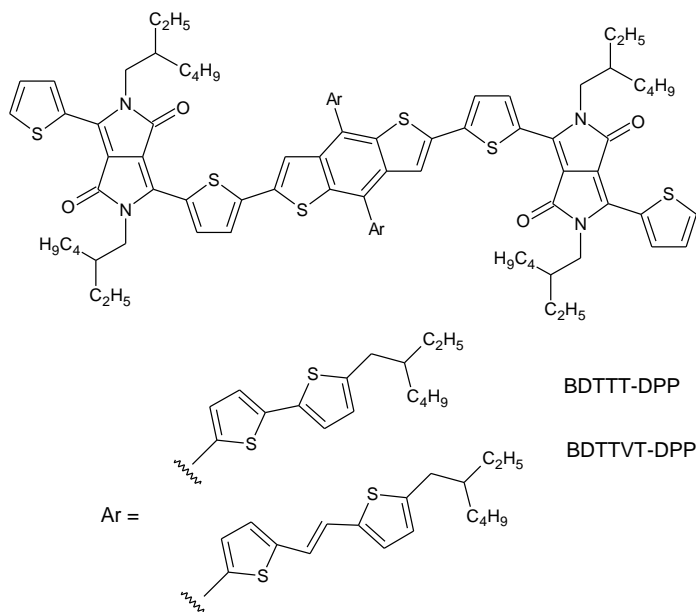


Obrázek 3 Molekuly DTNT-3DPP и DTNT(DPP-PN)₃

Obě molekuly mají vysokou tepelnou stabilitu s teplotou rozkladu asi 416-423 °C. Tyto výsledky jsou dobré pro použití těchto dvou molekul v solárních bateriích. Hodnoty LUMO/HOMO jsou -3,17/-5,13 eV pro DTNT(DPP-PN)₃ a -3,27/-5,42 eV pro DTNT-3DPP. Syntetizované molekuly DTNT-3DPP a DTNT(DPP-PN)₃ se používají jako donory spolu s PC71BM, které se používá jako akceptor při tvorbě solárních panelů. PCE je 3,47 % pro DTNT-3DPP a 3,69 % pro DTNT(DPP-PN)₃. Výsledné hodnoty PCE jsou mnohem vyšší než hodnoty PCE, které byly získány při použití trifenylaminu, což slouží jako důkaz toho, že zvýšení planárnosti jádra zlepšuje fotovoltaické vlastnosti organických solárních článků [12].

V roce 2018 Zhang a kol.[10] provedli výzkum s cílem vytvořit univerzální donory, které budou vykazovat dobré fotovoltaické vlastnosti jak s fullerenovými, tak s nefullerenovými akceptory, a také prozkoumat vliv různých konjugčních skupin na účinnost PV materiálů [10]. V roce 2016 Hou a kol.[13] studovali organické fotovoltaické materiály na bázi molekuly Benzodithiofenu (BDT). Studie zjistila, že BDT má silnou absorpci světla v širokém rozsahu, má dobrou pohyblivost nábojů a také vynikající morfologii, což vede ke zvýšení výkonu fotovoltaických materiálů [13]. S ohledem na tuto skutečnost byl jako jádro molekul použit benzo[1,2-b:4,5-b']dithiofen (BDT). Jako elektron-akceptorní skupina byla použita *N,N'* alkylovaná molekula DPP, protože ta také ukazuje dobrou planárnost, a také má silnou mezimolekulární interakci. Byly syntetizovány dvě molekuly BDTTT-DPP a BDTVT-DPP. Struktury viz. Obrázek č 4. Tyto deriváty byly připraveny Stilleho cross couplingovou reakcí příslušného dibromovaného derivátu DPP s organocínatým

derivátem BDT za katalýzy $[Pd(PPh_3)_4]$. Molekula BDTTT-DPP byla připravena ve výtěžku 71 %, BDTTV-TDPP ve výtěžku 68 %.



Obrázek 4 Molekuly BDTTT-DPP a BDTTVT-DPP

Obě molekuly mají vysokou tepelnou stabilitu. Teplota rozkladu je 395 °C pro BDTTT-DPP a 406 °C pro BDTTVT-DPP. Hodnoty LUMO/HOMO jsou -3,46/-5,04 eV resp. -3,43/-5,07 eV. Bandgap je 1,54 resp. 1,64 eV. Při kombinaci s fullerenovými akceptory molekuly BDTTT-DPP vzniká chromofor, který ukazuje nejlepší hodnotu PCE 5,53 %, a hodnota PCE se rovná 5,48 % při kombinaci s nefullerenovými akceptory. Organické solární baterie, ve kterých byl jako elektron-akceptor použit mix z fullerenových a nefullerenových akceptorů, a jako elektron-donor byl použit BDTTVT-DPP, ukázaly hodnotu PCE rovnající se 6,55 %. V důsledku této studie dostali vědci molekuly vykazující dobré spojení s moderním fullerenovým akceptorem nebo nefullerenovým akceptorem. To je významný objev, protože to ukázalo praktickou možnost vytvoření univerzálních donorů. Také bylo zjištěno, že použití mixu z fullerenových a nefullerenových akceptorů je perspektivním řešením pro zvýšení hodnoty PCE [10].

2.2.2. Použití DPP pro vytvoření molekul elektron-akceptorů

Dnes se nejčastěji při vytváření OSC jako elektron akceptorů používají fulleren a jeho deriváty, jsou to například ([6,6]-fenyl-C61/C71-butanová kyselina methyl ester) PC₆₁BM a PC₇₁BM. Je to způsobeno tím, že mají vysokou afinitu na elektrony a vysokou elektronovou mobilitu v jejich struktuře, izotropní transfer nábojů a také lehké fázové separace. Například, když je PC₇₁BM smícháno s některými vysoce účinnými polymerními donory nebo malými molekulami donorů za účelem zisku (BHj), účinnost přeměny záření na energii dosahuje 10 %. Nicméně fulleren a jeho deriváty mají velké nevýhody, které brání výrobě OSC na jeho základě v průmyslovém měřítku. Nevýhody spočívají v tom, že mají úzký rozsah absorpce, malou stabilitu, téměř plnou fixaci energetických hladin a také mají vyšší náklady na výrobu. To byl podnět k vytvoření nových alternativních nefullerenových elektron-akceptorů materiálů [14][15]. Tyto materiály musí mít vlastnosti fullerenových akceptorů, také by měly

brát v úvahu nevýhody fullerennových akceptorů a mít větší rozsah absorpce, stejně jako větší stabilitu a menší fixaci energetických hladin. Klíčové parametry při vytváření nefullerennových SM akceptorů jsou potřeba orientovat se na snížení hladiny LUMO a také na zvýšení disociace excitonů. Pro identifikaci a zkoumání nového druhu nefullerennového akceptorů je nejlépeší použít nejvíce studovaný a také komerčně dostupný polymerní donor poly(3-hexylthiophene) P3HT pro hodnocení účinnosti slunečních baterií [14][16].

Stejně jako u elektronových donorních molekul závisí účinnost elektron-akceptorních molekul na konjugační struktuře. To také zahrnuje kombinace donorních a akceptorních molekul. V příkladech předložených dále se jako akceptorní část používá molekula DPP. To je způsobeno tím, že molekula DPP má silné akceptorní vlastnosti, dobrou planárnost, stejně jako dobrý intramolekulární přenos nábojů. I přes to, že v posledních letech vědci dosáhli významného úspěchu v oblasti tvorby nefullerennových akceptorů, nemohou být tyto akceptory použity v komerční výrobě z důvodu jejich vysoké ceny a také poměrně složité syntéze. Pro výzkumníky je dnes velmi důležité nejen vytvořit efektivní akceptory, ale také maximálně zjednodušit a snížit náklady syntézy těchto molekul [17].

V roce 2016 napsali Bhosale a kol.[17] článek, ve kterém provádějí výzkum nového SM akceptoru (N7), syntetizovaného na bázi molekul DPP a molekul naftalen diimidu. N7 je to první elektron-akceptor, založený na karbazolu a také na molekulách DPP.

Tato molekula byla syntetizována přes Suzuki coupling reakce pomocí $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ jako katalyzátoru. Reakce probíhá při zvýšené teplotě v toluenu v přítomnosti uhličitanu cesného jako báze. Výtěžek finálního produktu činil 61 %. Schéma této reakce na schématu 3.

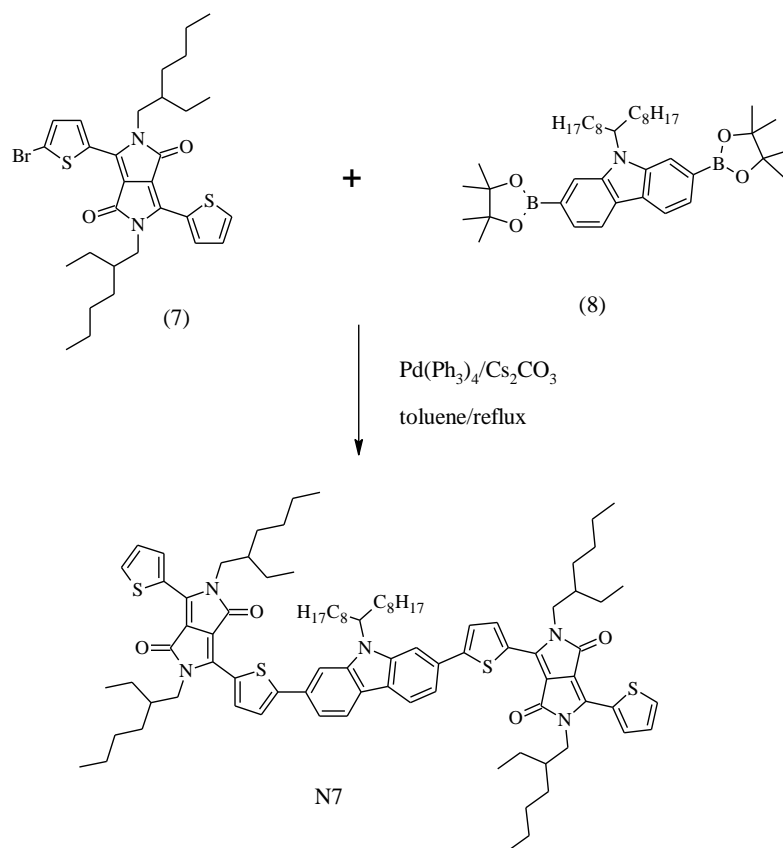
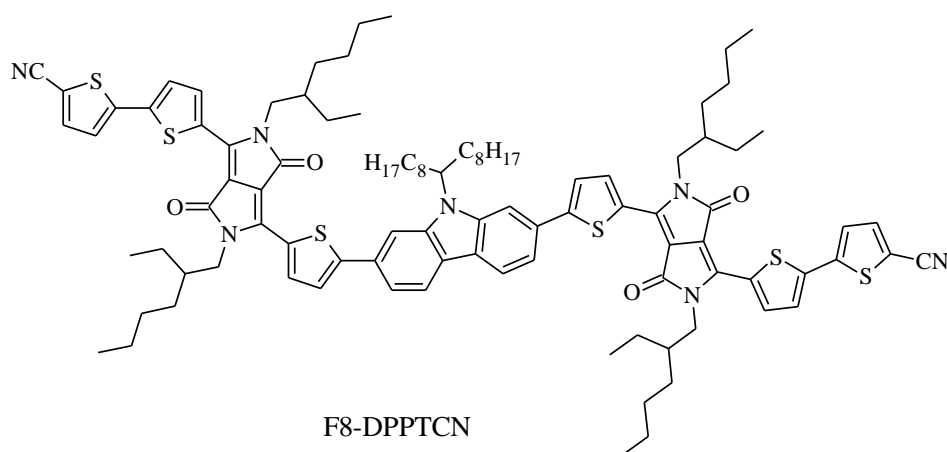


Schéma 3 Reakce přípravy molekuly N7

V rámci výzkumu byly stanoveny hodnoty LUMO/HOMO, které byly -3.74/-5.56 eV. Hodnota band gap byla 1,82 eV. Tato molekula má vysokou tepelnou stabilitu. Přibližná teplota rozkladu je 380 °C, což je velmi dobrým ukazatelem. Vytvořené solární články, ve kterých se N7 používá jako elektron-akceptor a P3HT jako elektron-donor, ukázaly PCE 3,15 %, což je velmi povzbudivým ukazatelem. Velmi dobrým výsledkem je, že molekula ukazuje jednu z nejvyšších hodnot PCE v kategorii elektron-akceptorů [17].

Zvláštní zájem představuje použití kyano skupin v molekulách SM akceptorů. To je způsobeno tím, že je to docela snadně tvořená skupina, která při vstupu do konjugací struktury vede k rozšíření absorpce světla, stejně jako k vyšší pohyblivost elektronů. Například, první studie ukázaly, že zavedení kyano skupiny do derivátů furan imidu dosáhla účinnost OSC až 1,86 %. Na základě těchto výzkumů v roce 2016 Russell a kol.[14] vytvořily molekulu F8-DPPTCN, kde jako jádro působí fluoren, na kterém jsou navázány molekuly thiophene-2-carbonitrile a diketopyrrolopyrrol (DPP). Finální produkt byl získán přes Suzuki coupling reakce. Výtěžek finálního produktu činil 70 %. Strukturu tyto molekuly můžete vidět na obrázku 5.



Obrázek 5 Molekula F8-DPPTCN

Studium dané molekuly ukázalo, že má dobrou rozpustnost v běžných organických rozpouštědlech jako jsou chloroform a dichlormethan. Také molekula má dobrou tepelnou stabilitu a rozloží se při teplotě asi 387 °C. Hodnoty LUMO/HOMO byly -3,65/-5,31 eV. Band gap činil 1,66 eV. OSC vytvořené na základě této molekuly ukázaly maximální hodnotu PCE 2,37 %. Výsledky PCE nejsou dostatečně vysoké. Změny PCE mohou být spojeny s morfologickými změnami, které dává naději na zlepšení hodnoty PCE v budoucnosti [14]. V roce 2016 si Cabaneros a kol.[18] dali za cíl syntézu jednoduché struktury, která by mohla být klidně použita se standardním elektron-donorem P3HT, a také studium vlivu ftalimidu na molekulu DPP. Syntetizovali molekulu DPP-Pht₂, spojením ftalimidu na molekulu *N,N'* alkylované DPP, která, jak se očekávalo, má některé vlastnosti nefullerenových akceptorů. Tato molekula byla získána přes Sonogashira cross-coupling reakce mezi DPP-Br₂ a 5 - Pht. Reakce probíhala ve směsi toluenu a diisopropylaminu, stejně jako v přítomnosti jodidu mědi při teplotě 50 °C. Výtěžek produktu činil 84 %. Schéma této reakce na schématu 4.

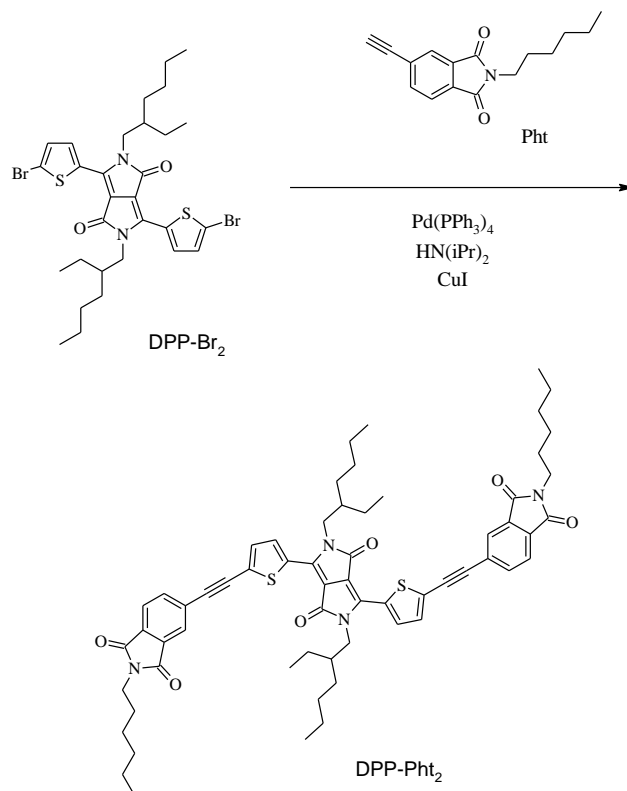


Schéma 4 Reakce přípravy molekuly DPP-Pht₂

Studium dané molekuly ukázalo, že hodnoty LUMO/HOMO byly -5.88/-4.13 eV. Band gap činil 1,75 eV. OSC vytvořené na základě této molekuly, kde se DPP-Pht₂ používá jako elektron-akceptor a P3HT jako elektron-donor, ukázaly PCE 3,28 %.

Výsledné hodnoty PCE jsou jedny z nejvyšších k dnešnímu dni, kdy jako akceptor byla použita molekula s DPP ve své struktuře. Tato studie ukázala, že použití ftalimidu může výrazně zvýšit účinnost solárních panelů, což dává impuls pro další výzkum [18].

Připojení ftalimidu na molekulu DPP zvýšilo hodnoty PCE až na rekordní ukazatele. Proto v roce 2016 Cabanetos a kol.[19] pokračovali v jejich cestě při výzkumu ftalimidů připojených na molekuly DPP. Chtěli ještě více zvýšit účinnost syntetizovaných molekul a zkoumat vliv různých alkylovaných skupin připojených k molekule ftalimidu.

Jako materiál pro srovnání byla použita molekula DPP-Pht₂. Vědci syntetizovali 3 nové molekuly na základě thiofenového DPP. Tato reakce probíhá přes Sonogashira cross coupling reakce, ve směsi toluenu a diisopropylaminu, stejně jako v přítomnosti jodidu mědi při teplotě 50 °C. Výtěžky produktů pro molekuly LLL, LBL, BLB a BBB činily 78 %, 84 %, 80 % a 52 %, resp. Schéma těchto reakcí na schématu 5.

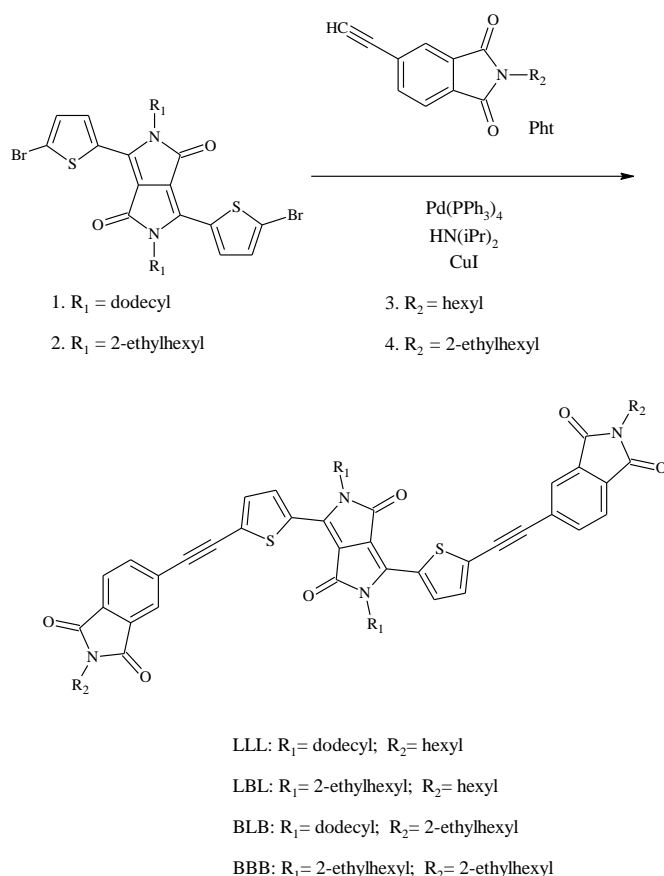


Schéma 5 Reakce přípravy molekul LLL, LBL, BLB, BBB

Všechny získané molekuly, kromě BBB, vykazují dobrou rozpustnost v běžných organických rozpouštědlech. Vytvořené OSC na základě těchto molekul jako akceptorů a P3HT jako elektron-donoru ukázaly hodnoty PCE 3,23 % pro LBL, 0,18 % pro LLL, 1,10 % pro BBB a 0,04 % pro BLB. I když vědci nedostali vysoké hodnoty PCE, v procesu výzkumu byl zobrazen velmi důležitý vztah mezi elektro-optickými vlastnostmi SM akceptorů od bočních řetězců [19].

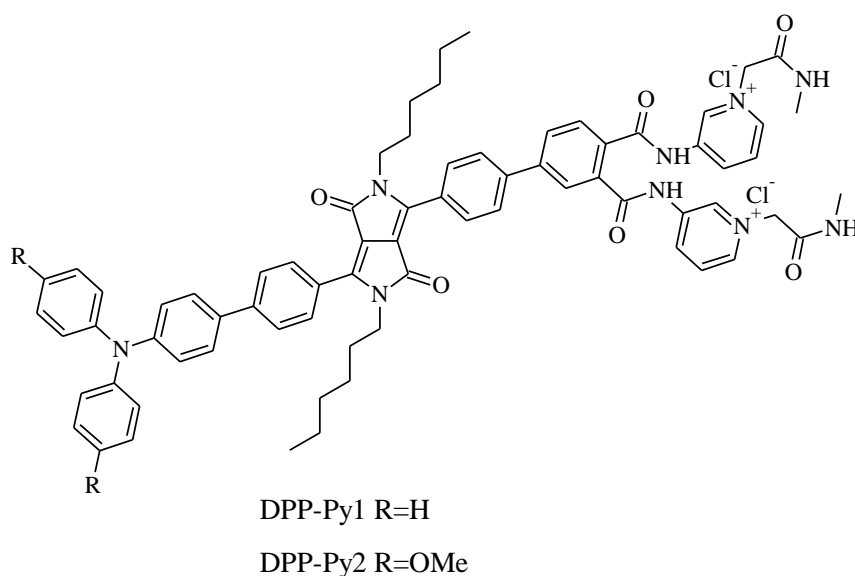
2.3. Biosensory

Existuje velké množství látek, které hrají důležitou roli jak pro živé organismy, tak i pro celý ekosystém. Množství těchto komponentů má velký vliv na efektivní práci biologických systémů. Nicméně, pro optimální funkčnost je nutné udržovat určitou koncentraci těchto látek. Zvýšení nebo snížení koncentrace vede k narušení funkčnosti biologických systémů. V souvislosti s tímto dnes před vědci stojí důležitý úkol: zajistit detekce, kvantifikace a odstranění těchto komponentů z ekologických nebo biologických systémů. Jedním z nejperspektivnějších způsobů detekce je použití fluorescenčních sond, díky kterým můžeme rozpoznávat ionty a malé molekuly v roztocích a pevných látkách nebo v živých organismech.

Základní princip sondy spočívá v tom, že má blok rozpoznávání iontů, které jsou připojeny k signalizačnímu bloku. Dále signalizační jednotka konvertuje biologický signál na optické signály, které jsou spojeny se změnami fotofyzických vlastností sond. Například interakce jistého specifického analytu s fluoforem, který je spojen s ionoforem, může vést ke zvýšení, případně ke snížení intenzity fluorescence [6].

I přes to, že k dnešnímu dni prošlo vytváření různých vysoce účinných materiálů na bázi DPP pro OFET, OLED a PV dobrým vývojem, použití molekul DPP u biosensorů ještě není dobře rozvinuto. Nicméně, díky silné fluorescenci a vysoké fotostabilitě je DPP perspektivní látkou pro vytvoření fluorescenčních sond na jeho základě [6][20].

V souvislosti s tím, že je na základě DPP vytvořeno velmi malé množství biosensorů, si v roce 2016 Hua a kol.[20] stanovili za cíl syntetizovat nové molekuly, které budou mít vysokou citlivost na molekuly citrátu. Pro tento výzkum byla vybrána *N,N'* alkylovaná fenylová molekula DPP. Centrální molekula DPP společně s trifenylnaminem tvoří signální blok. Jako blok rozpoznávání signálu slouží symetrický diamid na základě pyridinia. Byly syntetizovány dvě molekuly DPP-Py1 a DPP-Py2 viz. Obrázek č. 6.



Obrázek 6 Molekuly DPP-Py1 a DPP-Py2

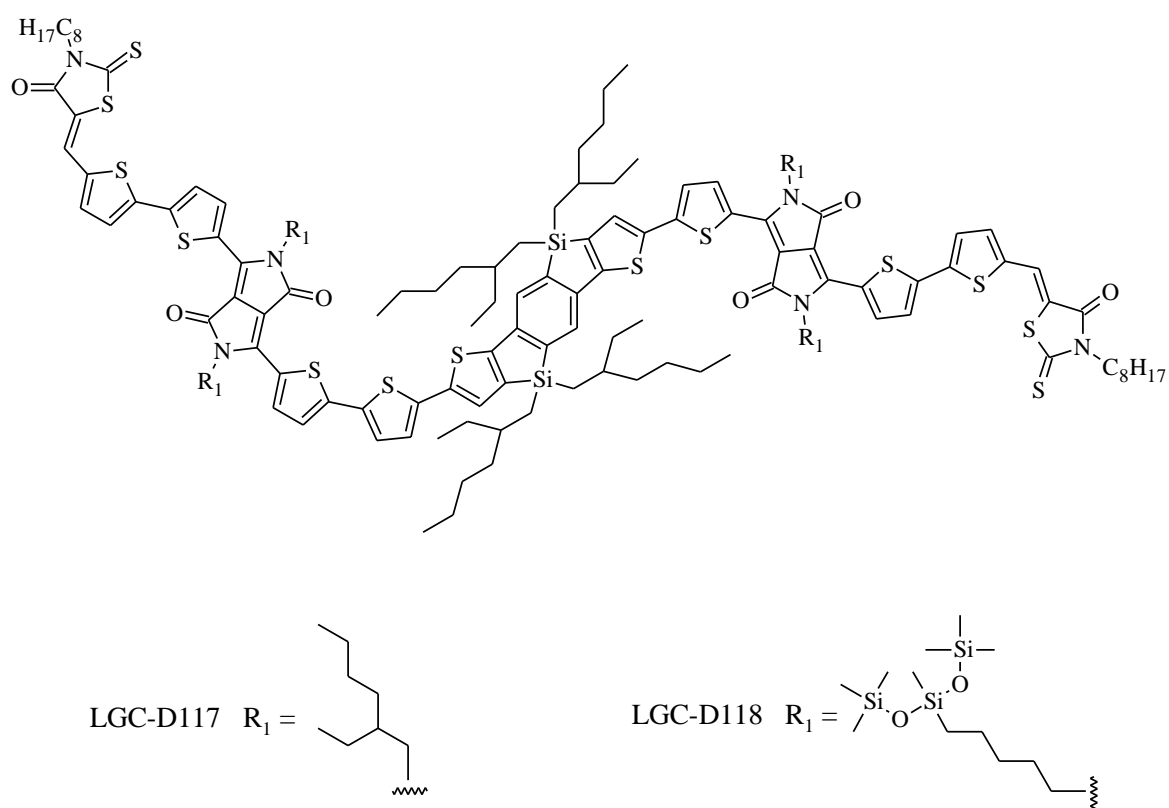
Studium připravených molekul ukázalo, že pracují na principu emise vyvolané agregací AIE (*Aggregation-Induced Emission*). Jedná se o fotofyzický fenomén, založený na tom, že některé fluorescenční materiály vykazují malou emisní schopnost v rozpuštěném stavu, ale silně fluoreskuje v pevném stavu ve formě agregátů. Získané molekuly tvoří komplex s molekulou citrátu. To vede ke zvýšení fluorescence těchto molekul. Molekula DPP-Py1 má jako senzor vyšší citlivost a také větší stabilitu v roztocích s různým pH. Proto je možné říci, že tato technologie pro definice citrátu je levnější, rychlejší a efektivnější než ostatní metody. Tento příklad ukazuje na perspektivu vytvoření efektivních biosensorů na bázi organických molekul DPP [20].

2.4. Organické polem řízené tranzistory

Velmi důležitým trendem v oblasti zkoumání konjugovaných molekul je tvorba nových organických zařízení na jejich základě. To jsou organické polem řízené tranzistory OFET (*Organic field-effect transistors*), které jsou základním komponentem analogových a digitálních integrovaných obvodů. Důležitým požadavkem při vytváření OFET zařízení je vytvoření organických polovodičů, které mají π -orbitální planárnost a také malé mezimolekulární vzdálenosti pro lepší přenos náboje. Jak bylo zjištěno z dřívějších studií,

konjugační polymery skládající se z elektron-donorních a také elektron-akceptorních částí, vytvořené podle designu D-A (donor-akceptor), mají velmi vysoké hodnoty pohyblivosti elektronů. V souvislosti s tím, že polymery vykazují vyšší mobilitu elektronů, byly dřívější studie většinou zaměřeny právě na ně. Nicméně, jak již bylo řečeno, polymery mají řadu nevýhod, které brání jejich výrobě v průmyslovém měřítku. Nyní je aktivní studium malých molekul, které jsou tvořené podle designu D-A. Díky tomu, že molekuly DPP ukazují vysoké hodnoty účinnosti v jiných organických zařízeních, tyto molekuly jsou perspektivním stavebním kamenem. Při vytváření vysoce účinných molekul mají také velký vliv boční řetězce, které ovlivňují rozpustnost, planárnost a také na možnost vzniku filmu [21].

V roce 2017 Noh a kol.[21] syntetizovali dvě nové molekuly LGC-D117 a LGC-D118 aby zvýšili hodnoty pro mobilitu elektronů viz. Obrázek č 7. Obě molekuly byly získány prostřednictvím reakci Knoevenagelovy kondenzace.



Obrázek 7 Reakce přípravy molekul LGC-D117 a LGC-D118

Taková struktura molekul nebyla zvolena náhodou. Jako elektron-donorní jádra byla použita molekula silaindacenodithiofen. Jako elektron-akceptorní skupina byla použita molekula dithiofenového DPP. Molekuly se od sebe liší skupinami připojenými na pozici N,N' molekul DPP. To je způsobeno tím, že vědci chtěli zjistit vliv různých alkylových skupin na fyzikální vlastnosti molekul. Syntetizované látky mají dobrou rozpustnost v běžných organických rozpouštědlech. Nicméně LGC-D118 má lepší rozpustnost, protože má větší a více rozvětvené alkylové skupiny. V důsledku dalšího výzkumu vědci zjistili, že největší hodnota mobility elektronů byla dosažena pro LGC-D118, a to $3,04 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. V důsledku toho lze říci, že vědci dosáhli úspěchu, neboť se podařilo vytvořit molekulu, která má dobrou elektronovou mobilitu a dobrou rozpustnost. Tato studie dává impuls pro další výzkum v oblasti vytváření SM molekuly organických polovodičů [21].

Rozpustné organické polovodiče přitahují pozornost tím, že je lze snadno syntetizovat v průmyslovém měřítku, což má vliv na cenu produkce. Nicméně, rozpustné organické sloučeniny mají omezené množství přítomných vodíkových vazeb, což vede k menší stabilitě molekul. Nerozpustné organické molekuly vytvářejí vodíkové vazby, což vede k vysokým hodnotám mobility nábojů kvůli bližším p-konjugačním strukturám. Je ale těžké je využít v průmyslovém měřítku, jelikož je obtížné je vyčistit a aplikovat na povrch. Rozpustnost molekuly DPP se zlepšuje díky zavedení alkylačních řetězců. V roce 2016 Krajčovič a kol.[22] navrhli přímou syntézu organického polovodiče na bázi molekuly DPP. Je tepelně stabilní a také rozpustné z důvodu inkorporace adamantyl-ethylových řetězců do molekuly DPP. Adamantan je velmi zajímavým zástupcem polycyklických nasycených uhlovodíků, vykazující velmi rigidní strukturu vedoucí k tvorbě vysoce uspořádaných systémů. To má za následek jednu z nejvyšších tepelných stabilit z uhlovodíkových derivátů.. Schéma syntézy je na schématu 6.

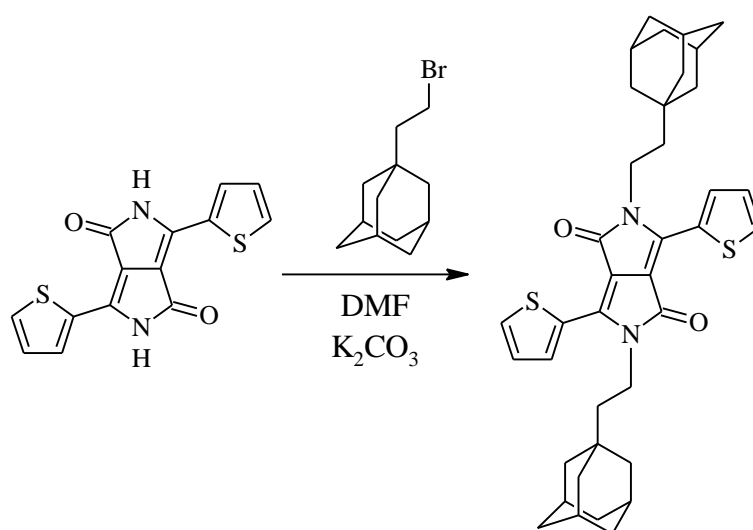


Schéma 6 Reakce přípravy molekuly

V důsledku výzkumu bylo zjištěno, že zavedení adamantyl-ethylové skupiny vede k tomu, že se výrazně zlepši organizovanost molekul DPP v pevném stavu. Materiál byl studován na základě technologie OFET. Výsledný derivát vykazoval hodnoty mobility děr $5 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Tato jednoduchá jednokroková syntéza, pomocí komerčně dostupných materiálů otevírá velké perspektivy pro průmyslovou výrobu, protože tato molekula vykazuje velmi výhodné vlastnosti nerozpustných derivátů DPP, jako je blízká vzdálenost DPP jader od sebe, napomáhající přenosu náboje, přestože výsledný derivát zůstává rozpustný v běžných organických rozpouštědlech [22].

2.5. Organická světlo emitující dioda

Organická světlo emitující dioda OLED (*Organic light-emitting diode*) je příkladem aktivního opto-elektronického zařízení. Princip fungování těchto zařízení je založen na elektroluminiscenci, kde je světlo reprodukováno z organických materiálů v elektrickém poli. OLED jsou tenká zařízení od 100 do 500 nm. Základní struktura OLED se skládá z emisní vrstvy a vodivé vrstvy, které jsou mezi dvěma elektrodami. Mezi vrstvami dochází k neustálému přerozdělování elektronů a děr. K dnešnímu dni existují dva hlavní typy

elektroluminiscenčních materiálů, to jsou materiály založené na malých molekulách a také na polymerech [23].

Nejzajímavější směr je práce OLED v blízko-infračervené spektrální oblasti (700-2000 nm). Tyto OLED zařízení se používají v medicíně, fotodynamické terapii, stejně jako v přístrojích pro noční vidění. Zatím je velmi těžké dosáhnout elektroluminiscence v infračervené oblasti. Nicméně, v roce 2016 Beverina a kol.[23] ukázaly syntézu derivátu DPP, který se nazývá DPPcy. Schéma syntézy je uvedeno na schemata 7.

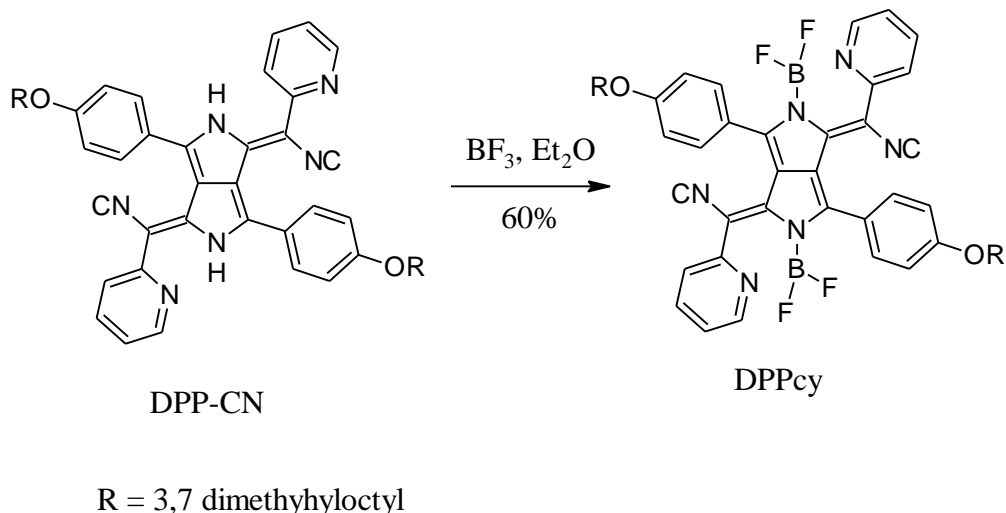


Schéma 7 Syntéza molekuly DPPcy

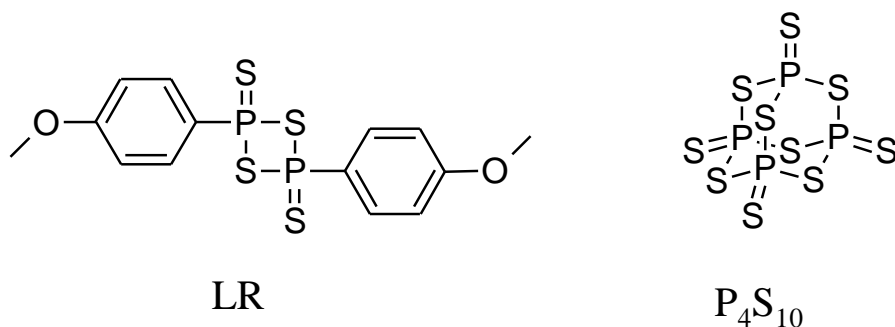
Syntetizované molekuly vykazují dobrou stabilitu. Získaná látka dává vysoký fotoluminiscenční kvantový výtěžek v okolí infračervené oblasti. Zkoumání OLED zařízení na základě této molekuly ukázaly nedostatek poklesu účinnosti, ale také vysokou provozní stabilitu při nepřetržitých 60 hodinách provozu. Tato studie přinesla významný přínos v rozvoj organických OLED zařízení, která pracují v blízko-infračervené spektrální oblasti [23].

2.6. Dithioketopyrrolopyrrol

Od první syntézy molekuly DPP v roce 1974 byly aktivně studovány deriváty na jejím základě a jsou aplikovány jako pigmenty v různých oblastech průmyslu. Dnes velký počet studií je zaměřen na studium různých derivátů DPP, ale velmi malé množství vědeckých článků je věnováno problematice modifikace karbonylové skupiny molekul DPP. Jednou z nejperspektivnějších oblastí výzkumu je studium molekuly dithioketopyrrolopyrrolu (DTTPP), v níž byl kyslík na laktamové skupině DPP nahrazen sírou. To vede k výrazným změnám jak optických, tak i fyzikálních vlastností molekuly [24].

2.6.1. Syntéza DTTPP

Způsoby tvorby molekul DTTPP spočívají v sulforizaci původní molekuly DPP pomocí sulforizačního materiálu například P4S10 nebo Lawessonova činidla LR (Lawesson's reagent) viz. Obrázek č 8.



Obrázek 8 Struktura základní molekuly DTPP

Jedna z prvních studií, která byla provedena na molekule DTPP, proběhla v roce 1989, když Mizuguchim a Homem[25] syntetizovali fenylový DTPP viz. [Schéma č 8](#).

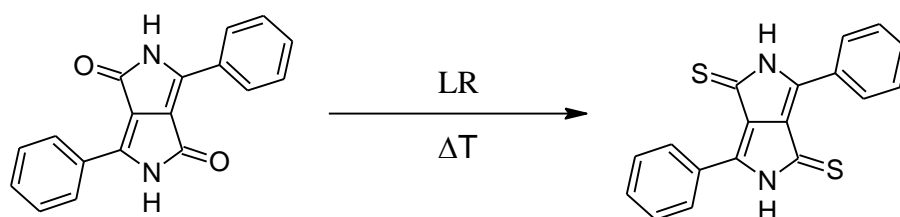


Schéma 8 Syntéza molekuly fenylového DTPP

2.6.2. Deriváty DTPP

Jak již bylo uvedeno výše, existuje velmi málo vědeckých prací o problematice DTPP, což vede k tomu, že vlastnosti těchto molekul nejsou dostatečně prostudovány. V roce 2013 Côté a kol.[24] provedli rozsáhlou studii s cílem syntetizovat a prostudovat, k jakým změnám vlastností dochází modifikací karbonylové skupiny DPP na thiokarbonylovou. Například, jak se mění optické vlastnosti a také stabilita molekuly. Za tímto účelem byly syntetizovány molekuly DPP-Th-S DPP-Fu-S a DPP- PFu-Th-S viz. [Schéma č 9](#). Všechny další studie jsou na srovnání těchto molekul s podobnými standardními DPP (DPP-Th-O, DPP-Fu-O nebo DPP-Fu-Th-S). Všechny tři molekuly jsou syntetizovány reakcí sulforizace počátečních N, N' alkylovaných DPP látkou LR. Reakce probíhá v HMPA (hexamethyl fosforová kyselina) při zvýšené teplotě. Výtěžky produktů byly 16 % pro DPP-Th-S, 56 % pro DPP-Fu-S a 31 % pro DPP-Fu-Th-S.

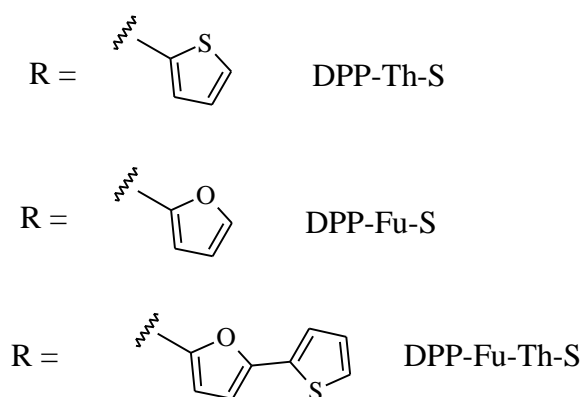
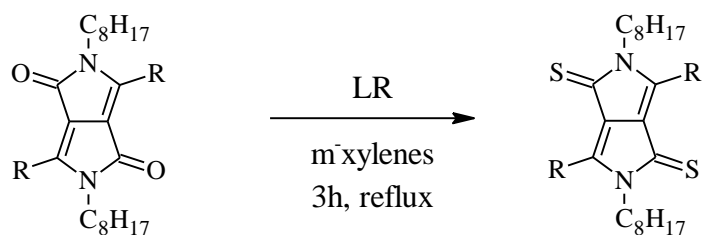
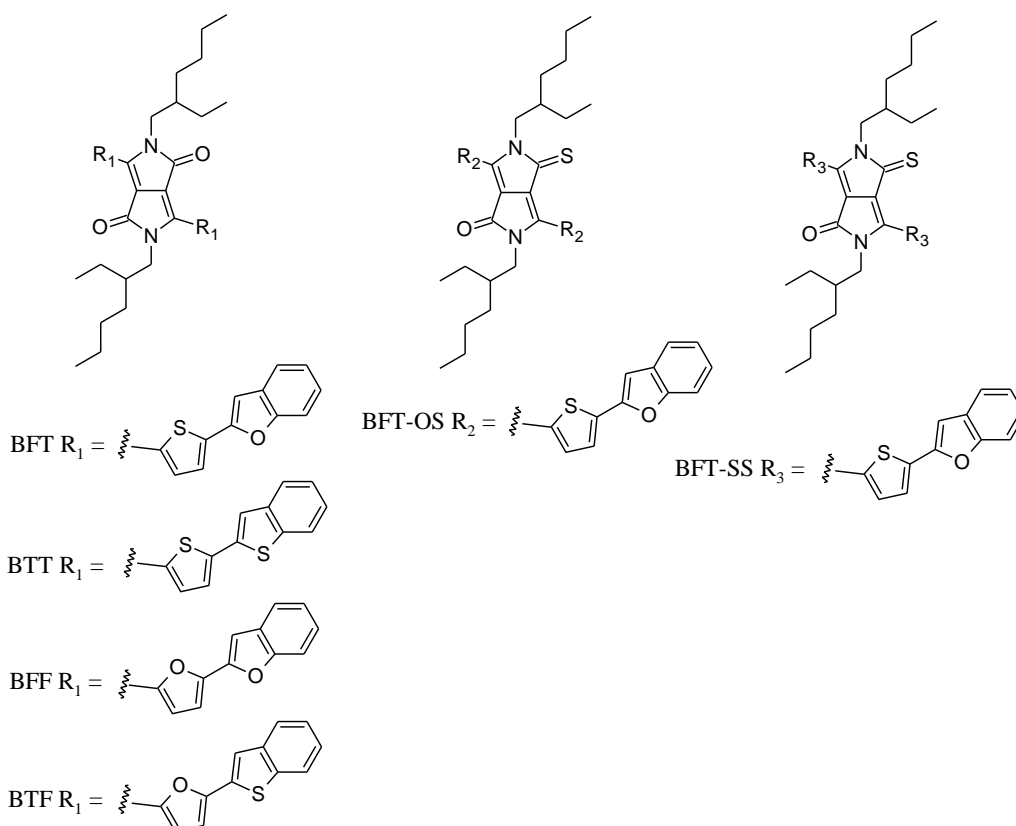


Schéma 9 Příprava molekul DPP-Th-S, DPP-Fu-S, DPP-Fu-Th-S

V průběhu výzkumu bylo zjištěno, že všechny tři syntetizované molekuly jsou nestabilní pod vnějším osvětlením a rozloží se během několika hodin. Molekuly DPP-Fu-S a DPP-Fu-Th-S mají dobrou stabilitu, pokud jsou uloženy ve tmě, zatímco molekula DPP-Th-S se rozloží i přes to, že se nachází na temném místě. Také bylo zjištěno, že zavedení síry namísto kyslíku vede ke snížení planárnosti molekul. Nicméně, thiokarbonylové DPP molekuly ukazují více rozšířenou absorpci při menší energii. V důsledku toho lze říci, že tyto molekuly mají dobrou perspektivu rozvoje [24].

V roce 2012 Roncali a kol.[26] provedli výzkum zaměřený na vytvoření efektivnějších elektron-donorů vytvořených na základě molekuly DPP. Tato studie také zahrnovala vliv použití thioketonových analogů DPP na účinnost solárních panelů ve srovnání se standardními DPP. Všechny molekuly byly syntetizovány podle designu D-A-D (donor-akceptor-donor). Bylo syntetizováno šest N, N' alkylovaných molekul (BFT, BT, BF, BTS, BFT-OS, BFT-SS). Struktura těchto molekul je na Obrázku 9.



Obrázek 9 Struktury molekul BFT, BTT, BFF, BTF, BFT-OS, BFT-SS

Byla stanovena tepelná stabilita a bylo zjištěno, že zavedení thioketo skupiny radikálně mění termické vlastnosti. BFT-SS se netaví a rozloží se při teplotě 160 °C. Molekula BFT-OS nebyla stabilní, což vedlo k tomu, že nemohla být prozkoumána v solárních bateriích. Thioketo skupiny prokázaly zmenšený bandgap z důvodu snížení hladiny LUMO. Nicméně, studium molekuly BFT-SS v organických solárních článcích ukázalo nedostatek fotovoltaiického efektu jako donoru, protože hodnota PCE byla < 0,001 % [26].

Na základě toho lze říci, že i když vyrobené solární baterie na bázi thioketonových derivátů DPP nemají vysokou účinnost, tak jsou velmi perspektivními látkami pro další studium nejen jako elektron-akceptorní částí, ale také mnoho dalších typů přístrojů v odvětví organické elektroniky. Nicméně tato oblast nadále zůstává málo prozkoumána a do budoucna má vysoký potenciál na svůj rozvoj [26].

2.7. Separační a analytické metody

V průběhu práce byly využívány následující analytické metody: chromatografii na tenké vrstvě, kolonovou kapalinovou chromatografii a NMR spektroskopii. Při organické syntéze je naprosto nezbytné použití řady chromatografických metod, a to od monitorování průběhu chemických reakcí po následné purifikace látek až jejich identifikace. V následujících kapitolách budou popsány principy nepoužívanějších technik v organické syntéze.

2.7.1. Chromatografie na tenké vrstvě

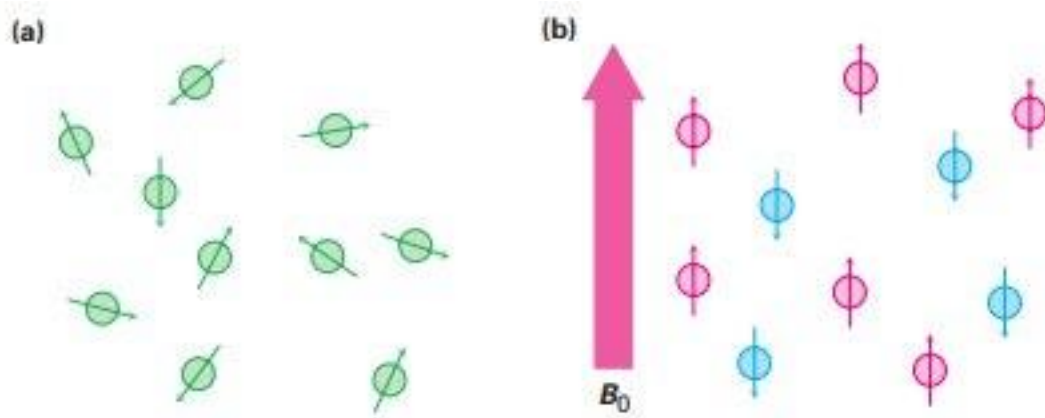
Chromatografie na tenké vrstvě neboli TLC (thin layer chromatography) je chromatografickou technikou, která je levným a rychlým způsobem pro identifikaci komponentů v reakční směsi. TLC představuje desku vyrobenou ze skla, plastu nebo hliníku, která je potažena tenkou vrstvou absorpční látky, například silikagel, Al_2O_3 , a tato látka je pevnou fází. Jako mobilní fáze se používají různá rozpouštědla, nebo jejich mix. Naše studovaná látka se ve velmi malém rozsahu aplikuje na desku, pak se deska umístí do speciální komůrky, s mobilní fází, a mobilní fáze začíná vzlínat na desku kvůli kapilárnímu efektu. Při TLC se také používají rozpouštědla, což znamená, že jestliže jednotlivé komponenty mixu budou mít velmi podobné vlastnosti jako rozpouštědla, tak tyto komponenty budou mít ve větší míře interakci k mobilní fázi. Nebo naopak. Různé látky studovaného mixu vzlínají na desce s různou rychlostí. Tak dojde k rozdělení mixu na jednotlivé látky. Mobilní fáze je vybrána na základě vlastností našich komponentů. Pak probíhá identifikace látky podle barvy pomocí UV, nebo podle retardačního faktoru. R_f – je to poměr vzdálenosti, kterou prošla látka a dosažené vzdálenosti mobilní fáze [27].

2.7.2. Kolonová kapalinová chromatografie

Chromatografie je velmi důležitou metodou, kde můžeme rozdělit, identifikovat a čistit komponenty mixu jak v kvalitativní, tak i v kvantitativní analýze. Sloupec obsahuje stacionární fázi, na které dojde k nanesení reakční směsi v kapalnou nebo pevnou fázi. Dále je nanášena mobilní fáze, která byla vybrána pomocí TLC, přidána do kolony, dále proud mobilní fáze přes stacionární fázi dělí naši reakční směs na jednotlivé složky. Tyto komponenty se následně shromažďují do různých nádob [2]. Typy interakcí mezi komponenty mixu, stacionární fáze a mobilní fáze jsou základem pro separaci molekul různých látek od sebe navzájem [28].

2.7.3. Nukleární magnetická rezonance

Je to velmi spolehlivá metoda pro určování struktury organických látek. Jádra atomů jsou reprezentovány jako takové, které se točí kolem své osy. Mají kladný náboj, což vede k tomu, že jsou v interakci s vnějším magnetickým polem. Ne všechny jádra však mají takové vlastnosti, nicméně proton H^1 a C^{13} mají spin. Když vnější magnetické pole chybí, spiny jsou rozloženy chaoticky, ale jakmile jádra spadají pod působení magnetického pole, spiny jsou orientovány na jednu stranu (Obrázek 10). Ve vnějším magnetickém poli mohou být spiny nasměrovány paralelně k magnetickému poli, nebo antiparalelně. Pokud spiny směřují paralelně k magnetickému poli, tak mají nižší úroveň energie, než ty, které směřují antiparalelně.



Obrázek 10 Spiny protonů bez magnetického pole (a) a v magnetickém pole (b)

Dále používáme energii elektromagnetického záření s určitou frekvencí. Energie je absorbována a jaderné spiny, které se nacházely na nižší energetické úrovni se pohybují do nejvyšší úrovně. Frekvence záření závisí na síle vnějšího magnetického pole a jader [29].

3. EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Experimentální část se zabývá přípravou základního thiofenového derivátu DTPP (B/4091), tento derivát byl následně využit k modifikaci, kdy byly do jeho skeletu na atomy síry zavedeny alkylové řetězce a byla připravena molekula B/5057. Dále byla provedena příprava fenylového derivátu DTPP (B/4096), pro srovnání reakčního průběhu sulforizace molekul DPP a také pro srovnání vlastností připravených produktu.

3.1. Chemikalie

1-bromdodekan (B/3006) Sigma-Aldrich, spol. s r.o.

Lawessonova činidla Sigma-Aldrich, spol. s r.o.

Silikagel 60 60 Å, 220–440 mesh, Sigma-Aldrich, spol. s r.o.

Aceton, čistý, 99%, PENTA, spol. s r.o.

Chlorbenzen, PENTA, spol. s r.o.

Metanol, p.a., 99,8%, PENTA, spol. s r.o.

Toluen, p.a., 99%, PENTA, spol. s r.o.

Uhličitan draselný (K₂CO₃), 99,99%, bezvodý, Sigma-Aldrich, spol. s r.o.

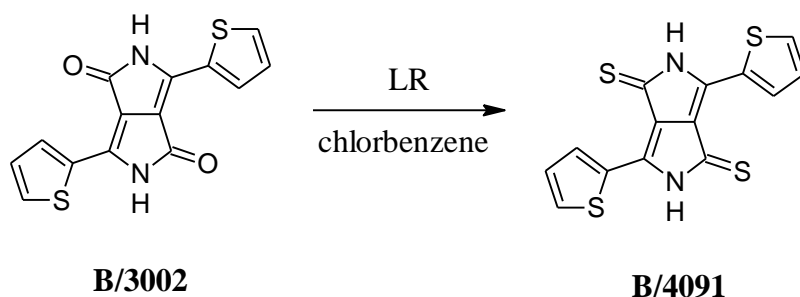
3.2. Seznam použitých přístrojů a analytických technik

TLC - Destičky Supelco, detektor UV lampa 254 nm.

Kolonová chromatografie - Silikagel 60 (220-440 mesh).

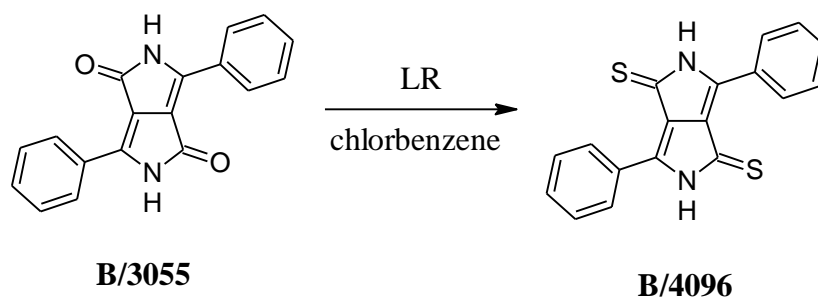
NMR - Bruker Shield 300 MHz, chemický posun je uváděn v ppm, vztahující se na signál Me₄Si 0,00 ppm.

3.3. Příprava derivátu DPP B/4091



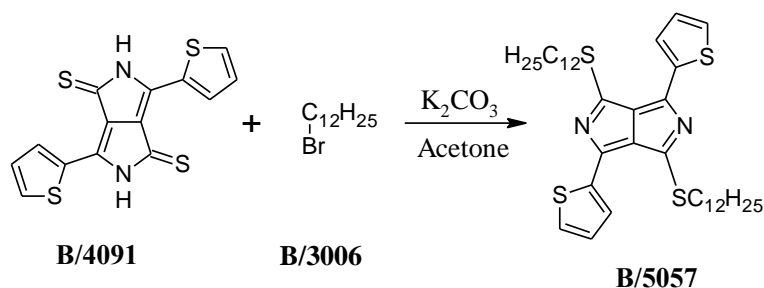
Do suché 100 ml trojhrdlé baňky obsahující inertní argonovou atmosféru bylo přidáno 60 ml chlorbenzenu. Pak bylo přidáno 1,04 g B/3002 (3,46 mmol) a 2,84 g LR (6,93 mmol). Reakční směs byla probublána argonem po dobu 30 min při laboratorní teplotě. Pak teplota reakční směsi byla zvýšena na 145 °C. Po 22 hodinách stálého míchání byla reakční směs ochlazená na 20 °C a byla zfiltrovaná přes filtrační papír. Dále filtrační papír byl promyt dvakrát 80 ml metanolu. Tuha organická fáze byla převedena z filtračního papíru do 250 ml kulaté baňky a suspendována v 150 ml metanolu. Po 90 min stálého míchání byla směs zfiltrovaná přes filtrační papír. Filtrační koláč byl dvakrát promyt 100 ml metanolu. Získaný materiál byl vysušen pod vakuum a bylo získáno 0,930 g (2,80 mmol) pevné, černé látky. CHNS analýza (C₁₄H₈N₂S₄) teoretická = C 50,57 %; H 2,43 %; N 8,43 %; S 38,58 %, stanovená = C 51,85 %; H 2,34 %; N 8,48 %; S 38,31 %. Teplota rozkladu: 387,44 °C (Obrázek 11).

3.4. Příprava derivátu DPP B/4096



Do suché 100 ml trojhrdlé baňky obsahující inertní argonovou atmosféru bylo přidáno 60 ml chlorbenzenu. Pak bylo přidáno 1,10 g B/3055 (3,82 mmol) a 2,84 g LR (7,63 mol). Reakční směs byla probublána argonem po dobu 30 min při laboratorní teplotě. Pak teplota reakční směsi byla zvýšena na 145 °C. Po 22 hodinách stálého míchání byla reakční směs ochlazena na 20 °C a byla zfiltrovaná přes filtrační papír. Dále filtrační papír byl promyt dvakrát 100 ml metanolu. Tuha organická fáze byla převedena z filtračního papíru do 250 ml kulaté baňky a suspendována v 150 ml metanolu. Po 80 min stálého míchání byla směs zfiltrovaná přes filtrační papír. Filtrační koláč byl dvakrát promyt 100 ml metanolu. Získaný materiál byl vysušen pod vakuum a bylo získáno 1,01 g (3,15 mmol) pevné, černé látky. CHNS analýza ($C_{18}H_{12}N_2S_2$) teoretická = C 67,47 %; H 3,75 %; N 8,74 %; S 20,01 %, stanovená = C 67,68 %; H 3,63 %; N 8,95 %; S 20,41 %. Teplota rozkladu: 379,62 °C (Obrázek 12).

3.5. Příprava derivátu DPP B/5057



Do suché 100 ml trojhrdlé baňky obsahující inertní argonovou atmosféru bylo přidáno 12 ml acetonu, 0,1006 g B/4091 (3,03 mmol) a 0,2252 g K_2CO_3 (1,51 mol). Reakční směs za stálého míchání byla probublána argonem po dobu 10 min při laboratorní teplotě. Poté bylo po kapkách přidáno 0,2782 g B/3006 (0,001059 mol). Reakční směs za stálého míchání byla vysušena argonem v době 20 min při laboratorní teplotě. Teplota reakční směsi se navýšila na 67 °C a směs byla míchána 15 hodin. Poté byla provedena TLC analýza.

TLC analýza, eluent: toluen

R_f skvrny (intenzivní šeda-modrá) = 0,80

Poté aceton byl oddestilován z reakční směsi. Pevná složka byla rozpuštěna v 20 ml chloroformu a zfiltrovaná přes filtrační papír. Poté filtrační papír byl promyt 40 ml chloroformu a pevná část byla vysušena pod vakuem a bylo získáno 0,3414 g pevné, tmavé fialové látky.

Purifikace surového produktu pomocí kolonové chromatografie:

0,3414 g získané pevné látky bylo rozpuštěno v chloroformu, k tomu byly přidány 2 lžičky silikagelu a po odpaření rozpouštědla byl tuhý materiál nanesen na chromatografický sloupec tvořený 72,77 g silikagelu (220-440 mesh) a byla provedena purifikace produktu pomocí kolonové chromatografie. Mobilní fáze byla tvořena čistým toluenem. Frakce obsahující požadovaný produkt byly slity a rozpouštědla odpařena. Výtěžek: 0,09 g (0,13 mmol) (46,4 %) tuhé tmavé fialové látky B/5057.

Struktura potvrzena pomocí 1H NMR analýzy (viz 8.2 Naměřená NMR spektra, Obrázek 10): 1H NMR (300 MHz, $CDCl_3$), δ (ppm): 8,09-8,08 (d, $J = 3,0$ Hz, 2H), 7,64-7,63 (d, $J = 4,5$ Hz, 2H), 7,28-7,25 (m, 2H), 3,52-3,48 (m, 4H), 1,92-1,83 (m, 4H), 1,53-1,48 (m, 6H), 1,34-1,26 (m, 28H), 0,90-0,86 (m, 8H). Teplota rozkladu: 251,47 °C (Obrázek 13)

4. VÝSLEDKY A DISKUZE

Molekuly B/4091 a B/4096 byly syntezovány přes reakcí sulforizací základních molekul DPP. Jako výchozí látky byly použity komerčně dostupné thiofenový DPP a fenylový DPP. Pro její přípravu byla zvolena syntetická cesta za použití LR jako sulforizační materiál. Jako prostředí reakce byl použit chlorbenzen. Reakcí proběhly úspěšně a díky výtěžku téměř 81 % bylo připraveno 0,93 g látky B/4091. Toto umožnilo provádění modifikací tohoto derivátu, které jsou hlavním předmětem experimentální části bakalářské práce. Díky výtěžku téměř 82% bylo připraveno 1,005 g látky B/4096.

Při srovnání reakcí sulforizace obou derivátů DPP bylo zjištěno, že obě reakce měly prakticky stejný reakční průběh a také výtěžky produktů byly srovnatelné (cca 80 %). Připravené deriváty měli stejnou černou barvu.

Modifikace, která byla provedena v rámci této práce je *S,S'*-alkylace, kdy cílem bylo začlenění dodekanových řetězců do struktury derivátů DPP na atomy síry. Tato *S,S'*-alkylace derivátu byla prováděna v prostředí acetonu. Alkylačním činidlem byl použit přibližně trojnásobek 1-bromdodekanu (B/3006), pro tvorbu alkalické soli byl také použit uhličitan draselný. Mechanismem nukleofilní substituce došlo k *S,S'*-alkylaci. Poté reakční směs byla zpracována a byla provedena purifikace kolonovou chromatografií. Výtěžek reakce byl téměř 46 %, což je dobrým výsledkem. Konečná analýza připraveného derivátu pomocí ¹H NMR spektroskopie potvrdila strukturu molekuly B/5057.

5. Závěr

Lidstvo je dnes stále více závislé na elektrické energii a také na zařízeních fungujících na elektrickou energii. To vede k tomu, že se vědci snaží stále více zjednodušit a zlevnit jejich výrobu. Nejčastějšími materiály pro vytvoření elektroniky jsou anorganické materiály. Nicméně, v posledních letech začíná být kladen stále větší důraz na organickou elektroniku, kde jsou jako hlavní elektricky vodivé materiály používány organické látky. Výhodami organické elektroniky, ve srovnání s anorganickými protějšky, jsou jejich nízké náklady na výrobu. Důležitou výhodou je také velké množství chemických modifikací, pomocí kterých je možné spravovat nastavení organických složek.

Pro efektivní přenos náboje musí mít organické molekuly konjugální strukturu a volné nositele nábojů. Molekula DPP je příkladem takové struktury. Po otevření této molekuly v roce 1974 je předmětem podrobného zkoumání. K dnešnímu dni se DPP používá pro vytvoření takových organických elektronických zařízení, jako je OFET, OLED, OSC a biosensory. Experimentální část bakalářské práce zahrnuje syntézu thiofenového derivátu DTPP (B/4091), syntézu fenylového derivátu DTPP (B/4096), a *S,S'* alkylace derivátu B/4091 s cílem získat derivát B/5057. Úkolem bylo zjednodušit proces modifikace molekul DTPP a připravit základ pro další zkoumání těchto molekul v oblasti organické elektroniky.

6. SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

- [1] HAU, Steven K., Hin-Lap YIP, Orb ACTON, Nam Seob BAEK, Hong MA a Alex K.-Y. JEN. Interfacial modification to improve inverted polymer solar cells. *Journal of Materials Chemistry*. 2008, 18(42), 5113-. DOI: 10.1039/b808004f. ISSN 0959-9428. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=b808004f>
- [2] ANTHONY, John E. Functionalized Acenes and Heteroacenes for Organic Electronics. *Chemical Reviews*. 2006, 106(12), 5028-5048. DOI: 10.1021/cr050966z. ISSN 0009-2665. Dostupné také z: <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/cr050966z>
- [3] SOKOLOV, Anatolij N., Benjamin C-K. TEE, Christopher J. BETTINGER, Jeffrey B.-H. TOK a Zhenan BAO. Chemical and Engineering Approaches To Enable Organic Field-Effect Transistors for Electronic Skin Applications. *Accounts of Chemical Research*. 2011, 45(3), 361-371. DOI: 10.1021/ar2001233. ISSN 0001-4842. Dostupné také z: <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/ar2001233>
- [4] GRZYBOWSKI, Marek a Daniel T. GRYKO. Diketopyrrolopyrroles: Synthesis, Reactivity, and Optical Properties. *Advanced Optical Materials*. 2015, 3(3), 280-320. DOI: 10.1002/adom.201400559. ISSN 21951071. Dostupné také z: <http://doi.wiley.com/10.1002/adom.201400559>
- [5] HAO, Zhimin a Abul IQBAL. Some aspects of organic pigments. *Chemical Society Reviews*. 1997, 26(3), 203-. DOI: 10.1039/cs9972600203. ISSN 0306-0012. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=cs9972600203>
- [6] KAUR, Matinder a Dong Hoon CHOI. Diketopyrrolopyrrole: brilliant red pigment dye-based fluorescent probes and their applications. *Chemical Society Reviews*. 2015, 44(1), 58-77. DOI: 10.1039/C4CS00248B. ISSN 0306-0012. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C4CS00248B>
- [7] BAGDE, Sushil S., Hanok PARK, Seon-nam YANG, Sung-Ho JIN a Soo-Hyoung LEE. Diketopyrrolopyrrole-based narrow band gap donors for efficient solution-processed organic solar cells. *Chemical Physics Letters*. 2015, **630**, 37-43. DOI: 10.1016/j.cplett.2015.04.032. ISSN 00092614. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S000926141500278X>
- [8] JIN, Ruifa a Kai WANG. Rational Design of Diketopyrrolopyrrole-Based Small Molecules as Donating Materials for Organic Solar Cells. *International Journal of Molecular Sciences*. 2015, **16**(9), 20326-20343. DOI: 10.3390/ijms160920326. ISSN 1422-0067. Dostupné také z: <http://www.mdpi.com/1422-0067/16/9/20326>
- [9] PATIL, Yuvraj, Rajneesh MISRA, Abhishek SHARMA a Ganesh D. SHARMA. D-A-D- π -D-A-D type diketopyrrolopyrrole based small molecule electron donors for bulk heterojunction organic solar cells. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2016, **18**(25), 16950-16957. DOI: 10.1039/C6CP02700H. ISSN 1463-9076. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C6CP02700H>
- [10] HUO, Yong, Jingshuai ZHU, Xiao-Zhen WANG, Cenqi YAN, Yun-Fei CHAI, Zi-Zhen CHEN, Xiaowei ZHAN a Hao-Li ZHANG. Small molecule donors based on benzodithiophene and diketopyrrolopyrrole compatible with both fullerene and non-fullerene acceptors. *Journal of Materials Chemistry C*. 2018, **2018**, -. DOI: 10.1039/C8TC00799C. ISSN 2050-7526. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C8TC00799C>

- [11] LIU, Qian, Abhijith SURENDRAN, Krishna FERON, et al. Diketopyrrolopyrrole based organic semiconductors with different numbers of thiophene units: symmetry tuning effect on electronic devices. *New Journal of Chemistry*. 2018, **42**(6), 4017-4028. DOI: 10.1039/C7NJ03505E. ISSN 1144-0546. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C7NJ03505E>
- [12] TAN, Hua, Wenhong PENG, Hongjian LIU, et al. Two T-Shaped Donor-Acceptor Small Molecules Based on 4,9-Di(thiophen-2-yl)naphtho[2,3-b]thiophene for Solution-Processed Organic Solar Cells. *European Journal of Organic Chemistry*. 2016, **2016**(30), 5127-5135. DOI: 10.1002/ejoc.201600858. ISSN 1434193X. Dostupné také z: <http://doi.wiley.com/10.1002/ejoc.201600858>
- [13] YAO, Huifeng, Long YE, Hao ZHANG, Sunsun LI, Shaoqing ZHANG a Jianhui HOU. Molecular Design of Benzodithiophene-Based Organic Photovoltaic Materials. *Chemical Reviews*. 2016, **116**(12), 7397-7457. DOI: 10.1021/acs.chemrev.6b00176. ISSN 0009-2665. Dostupné také z: <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemrev.6b00176>
- [14] LI, Shuixing, Jieli YAN, Chang-Zhi LI, Feng LIU, Minmin SHI, Hongzheng CHEN a Thomas P. RUSSELL. A non-fullerene electron acceptor modified by thiophene-2-carbonitrile for solution-processed organic solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*. 2016, **4**(10), 3777-3783. DOI: 10.1039/C6TA00056H. ISSN 2050-7488. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C6TA00056H>
- [15] SHI, Hangqi, Weifei FU, Minmin SHI, Jun LING a Hongzheng CHEN. A solution-processable bipolar diketopyrrolopyrrole molecule used as both electron donor and acceptor for efficient organic solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*. 2015, **3**(5), 1902-1905. DOI: 10.1039/C4TA06035K. ISSN 2050-7488. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C4TA06035K>
- [16] RANANAWARE, Anushri, Akhil GUPTA, JingLiang LI, Ante BILIC, Lathe JONES, Suresh BHARGAVA a Sheshanath V. BHOSALE. A four-directional non-fullerene acceptor based on tetraphenylethylene and diketopyrrolopyrrole functionalities for efficient photovoltaic devices with a high open-circuit voltage of 1.18 V. *Chemical Communications*. 2016, **52**(55), 8522-8525. DOI: 10.1039/C6CC03730E. ISSN 1359-7345. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C6CC03730E>
- [17] RAYNOR, Aaron M., Akhil GUPTA, Hemlata PATIL, Di MA, Ante BILIC, Trevor J. ROOK a Sheshanath V. BHOSALE. A non-fullerene electron acceptor based on central carbazole and terminal diketopyrrolopyrrole functionalities for efficient, reproducible and solution-processable bulk-heterojunction devices. *RSC Advances*. 2016, **6**(33), 28103-28109. DOI: 10.1039/C6RA01558A. ISSN 2046-2069. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C6RA01558A>
- [18] JOSSE, Pierre, Clément DALINOT, Yue JIANG, Sylvie DABOS-SEIGNON, Jean RONCALI, Philippe BLANCHARD a Clément CABANETOS. Phthalimide end-capped thienoisindigo and diketopyrrolopyrrole as non-fullerene molecular acceptors for organic solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*. 2016, **4**(1), 250-256. DOI: 10.1039/C5TA09171C. ISSN 2050-7488. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C5TA09171C>
- [19] JOSSE, Pierre, Antoine LABRUNIE, Clément DALINOT, et al. Effect of side chains on the electronic and photovoltaic properties of diketopyrrolopyrrole-based molecular acceptors. *Organic Electronics*. 2016, **37**, 479-484. DOI: 10.1016/j.orgel.2016.07.030.

ISSN 15661199. Dostupné také z:
<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1566119916303287>

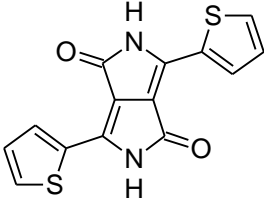
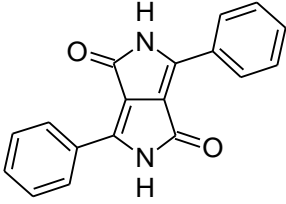
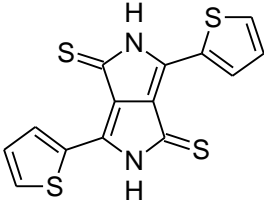
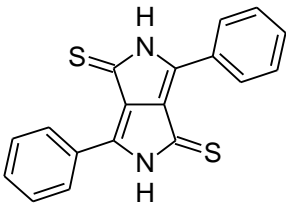
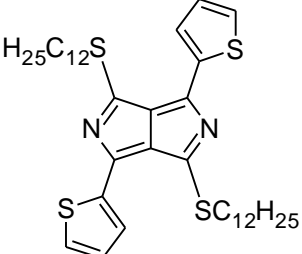
- [20] HANG, Yandi, Jian WANG, Tao JIANG, Niannian LU a Jianli HUA. Diketopyrrolopyrrole-Based Ratiometric/Turn-on Fluorescent Chemosensors for Citrate Detection in the Near-Infrared Region by an Aggregation-Induced Emission Mechanism. *Analytical Chemistry*. 2016, 88(3), 1696-1703. DOI: 10.1021/acs.analchem.5b03715. ISSN 0003-2700. Dostupné také z: <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.analchem.5b03715>
- [21] LIM, Bogyu, Huabin SUN, Jaechol LEE a Yong-Young NOH. High Performance Solution Processed Organic Field Effect Transistors with Novel Diketopyrrolopyrrole-Containing Small Molecules. *Scientific Reports*. 2017, 7(1), -. DOI: 10.1038/s41598-017-00277-7. ISSN 2045-2322. Dostupné také z: <http://www.nature.com/articles/s41598-017-00277-7>
- [22] KOVALENKO, Alexander, Cigdem YUMUSAK, Patricie HEINRICHOVA, et al. Adamantane substitutions: a path to high-performing, soluble, versatile and sustainable organic semiconducting materials. *Journal of Materials Chemistry C*. 2017, 5(19), 4716-4723. DOI: 10.1039/C6TC05076J. ISSN 2050-7526. Dostupné také z: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C6TC05076J>
- [23] SASSI, Mauro, Nunzio BUCCHERI, Myles ROONEY, Chiara BOTTA, Francesco BRUNI, Umberto GIOVANELLA, Sergio BROVELLI a Luca BEVERINA. Near-infrared roll-off-free electroluminescence from highly stable diketopyrrolopyrrole light emitting diodes. *Scientific Reports*. 2016, 6(1), -. DOI: 10.1038/srep34096. ISSN 2045-2322. Dostupné také z: <http://www.nature.com/articles/srep34096>
- [24] LÉVESQUE, Simon, David GENDRON, Nicolas BÉRUBÉ, François GRENIER, Mario LECLERC a Michel CÔTÉ. Thiocarbonyl Substitution in 1,4-Dithioketopyrrolopyrrole and Thienopyrroledithione Derivatives: An Experimental and Theoretical Study. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2014, 118(8), 3953-3959. DOI: 10.1021/jp411300h. ISSN 1932-7447. Dostupné také z: <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp411300h>
- [25] MIZUGUCHI, Jin. Temperature dependence of the dark conductivity and photoconductivity in evaporated thin films of 1,4-dithioketo-3,6-diphenyl-pyrrolo- [3,4- c]-pyrrole under a high vacuum or in the atmosphere of oxygen or hydrogen. *Journal of Applied Physics*. 1989, 66(7), 3111-3113. DOI: 10.1063/1.344143. ISSN 0021-8979. Dostupné také z: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.344143>
- [26] RIPAUD, Emilie, Dora DEMETER, Théodulf ROUSSEAU, Emmanuel BOUCARD-CÉTOL, Magali ALLAIN, Riccardo PO, Philippe LERICHE a Jean RONCALI. Structure-properties relationships in conjugated molecules based on diketopyrrolopyrrole for organic photovoltaics. *Dyes and Pigments*. 2012, 95(1), 126-133. DOI: 10.1016/j.dyepig.2012.03.021. ISSN 01437208. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0143720812000770>
- [27] AN OVERVIEW ON THIN LAYER CHROMATOGRAPHY. *International journal of pharmaceutical sciences and research*. 2011, 2(2), -. DOI: 10.13040/IJPSR.0975-8232.2(2).256-67. ISSN 23205148.
- [28] COSKUN, Ozlem. Separation Techniques: CHROMATOGRAPHY. *Northern Clinics of Istanbul*. 2016, , -. DOI: 10.14744/nci.2016.32757. ISSN 21484902.
- [29] MCMURRY, John. *Organic chemistry*. 8th ed. Belmont: Brooks/Cole, c2012. ISBN 978-0840054449.

7. SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

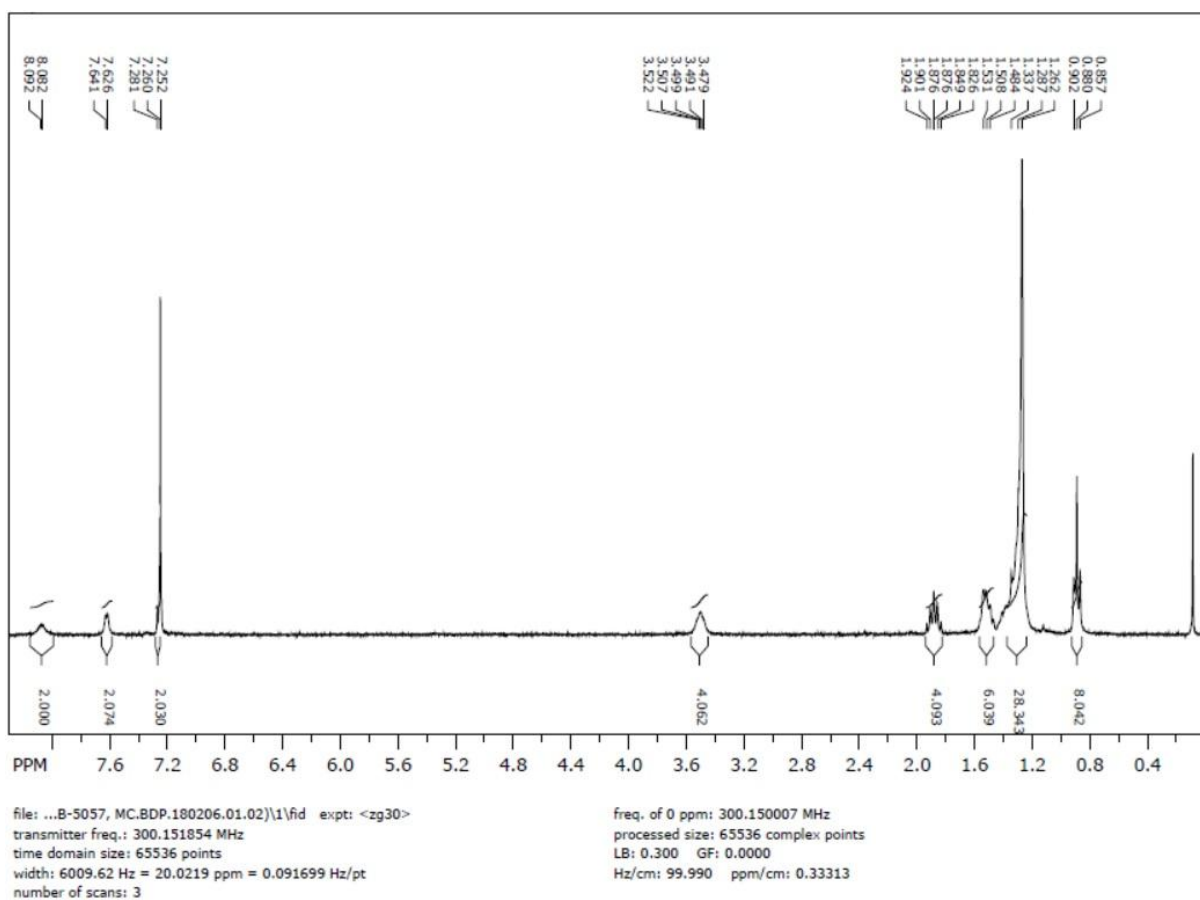
<i>Zkratka</i>	<i>Význam</i>
AIE:	emise vyvolané agregací (<i>Aggregation-Induced Emission</i>)
BDF:	benzodifuranon
BHJ:	objemový heteropřechod (<i>Bulk heterojunction</i>)
CC:	kolonová chromatografie (<i>Column chromatography</i>)
DPP:	2,5-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrrol-1,4-dion, zkráceně diketopyrrolopyrrol
DTPP:	2,5-dihydropyrrolo[3,4-c]pyrrol-1,4-dithion, zkráceně dithioketopyrrolopyrrol
E ⁺ :	elektrofil
EDG:	elektron-donorní skupina (<i>Electron-donating group</i>)
EWG:	elektron-akceptorní skupina (<i>Electron-withdrawing group</i>)
HOMO:	nejvyšší elektrony obsazený molekulový orbital (<i>Highest occupied molecular orbital</i>)
LC:	kapalinová chromatografie (<i>Liquid chromatography</i>)
LR:	lawessonovo činidlo (<i>Lawesson's reagent</i>)
LUMO:	nejnižší elektrony neobsazený molekulový orbital (<i>Lowest unoccupied molecular orbital</i>)
NMR:	nukleární magnetická rezonance (<i>Nuclear magnetic resonance</i>)
Nu ⁻ :	nukleofil
OFET:	organické polem řízené tranzistory (<i>Organic field-effect transistor</i>)
OLED:	organická světlo emitující dioda (<i>Organic light-emitting diode</i>)
OSC:	organické solární články (<i>Organic solar cells</i>)
PCBM:	derivát fullerenu (<i>Phenyl-C61-butyric acid methyl ester</i>)
PCE:	účinnost (<i>Power Conversion Efficiency</i>)
R _F :	retenční faktor
SM:	malá molekula (<i>Small Molecule</i>)
THF:	tetrahydrofuran
TLC:	chromatografie na tenké vrstvě (<i>Thin layer chromatography</i>)
TGA:	termogravimetrická analýza (<i>Thermogravimetric analysis</i>)

8. SEZNAM PŘÍLOH

8.1. Seznam sloučenin

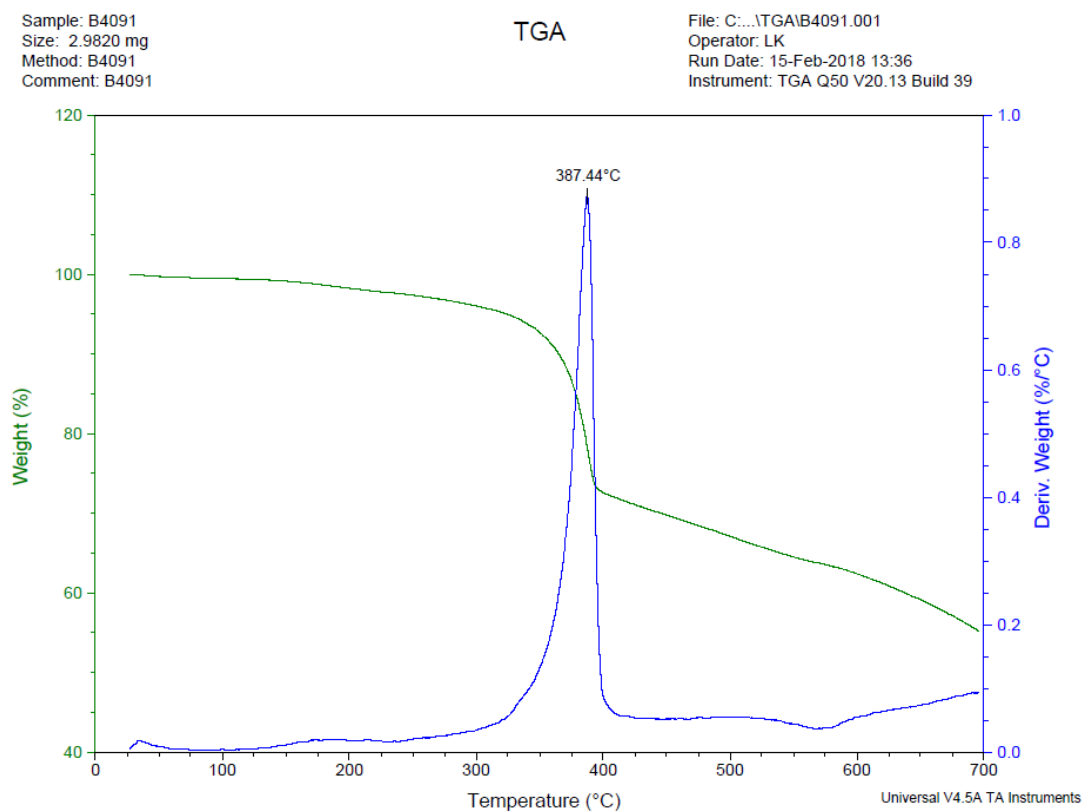
Popis	Struktura
<p>1) Kód: B/3002 Název: 3,6-di(thiofen-2-yl)-2,5-dihydropyrrolo [3,4-<i>c</i>]pyrrol-1,4-dion Molekulový vzorec = C₁₄H₈N₂O₂S₂ Molekulová hmotnost = 300,36 g/mol</p>	
<p>2) Kód: B/3006 Název: 1-bromdodekan Molekulový vzorec = C₁₂H₂₅Br Molekulová hmotnost = 249,23 g/mol</p>	$\begin{matrix} \text{C}_{12}\text{H}_{25} \\ \text{Br} \end{matrix}$
<p>3) Kód: B/3055 Název: 3,6-difenyl-2,5-dihydropyrrolo [3,4-<i>c</i>]pyrrol-1,4-dion Molekulový vzorec = C₁₈H₁₂N₂O₂ Molekulová hmotnost = 288,30 g/mol</p>	
<p>4) Kód: B/4091 Název: 3,6-di(thiofen-2-yl)-2,5-dihydropyrrolo [3,4-<i>c</i>]pyrrol-1,4-dithion Molekulový vzorec = C₁₄H₈N₂S₄ Molekulová hmotnost = 332,49 g/mol</p>	
<p>5) Kód: B/4096 Název: 3,6-difenyl-2,5-dihydropyrrolo [3,4-<i>c</i>]pyrrol-1,4-dithion Molekulový vzorec = C₁₈H₁₂N₂S₂ Molekulová hmotnost = 320,43 g/mol</p>	
<p>6) Kód: B/5057 Název: <i>S,S'</i>-Dodecyl-Thiofen-Pyrrolo[3,4-<i>c</i>] pyrrol-1,4-dithion Molekulový vzorec = C₃₈H₅₆N₂S₄ Molekulová hmotnost = 669,12 g/mol</p>	

8.2. Naměřená NMR spektra

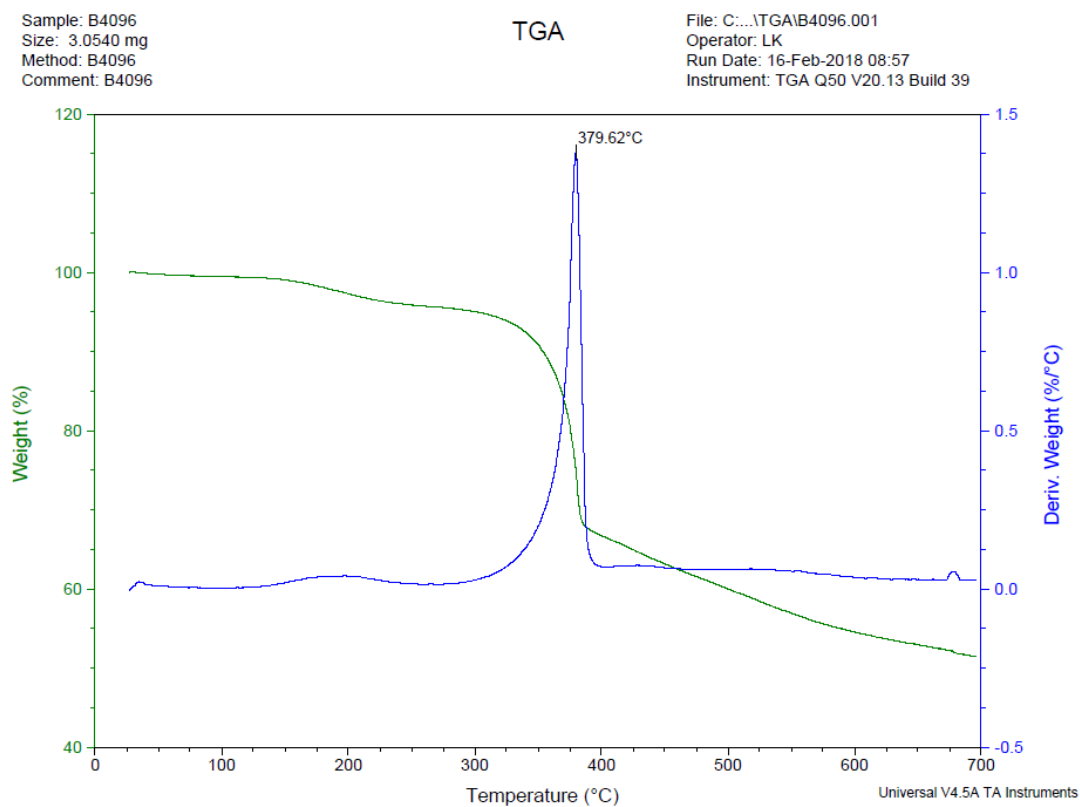


Obrázek 10 ^1H NMR spectrum B/5057

8.3. Termogravimetrická analýza připravených derivátů DPP



Obrázek 11 Termogravimetrická analýza (TGA) derivátu B/4091

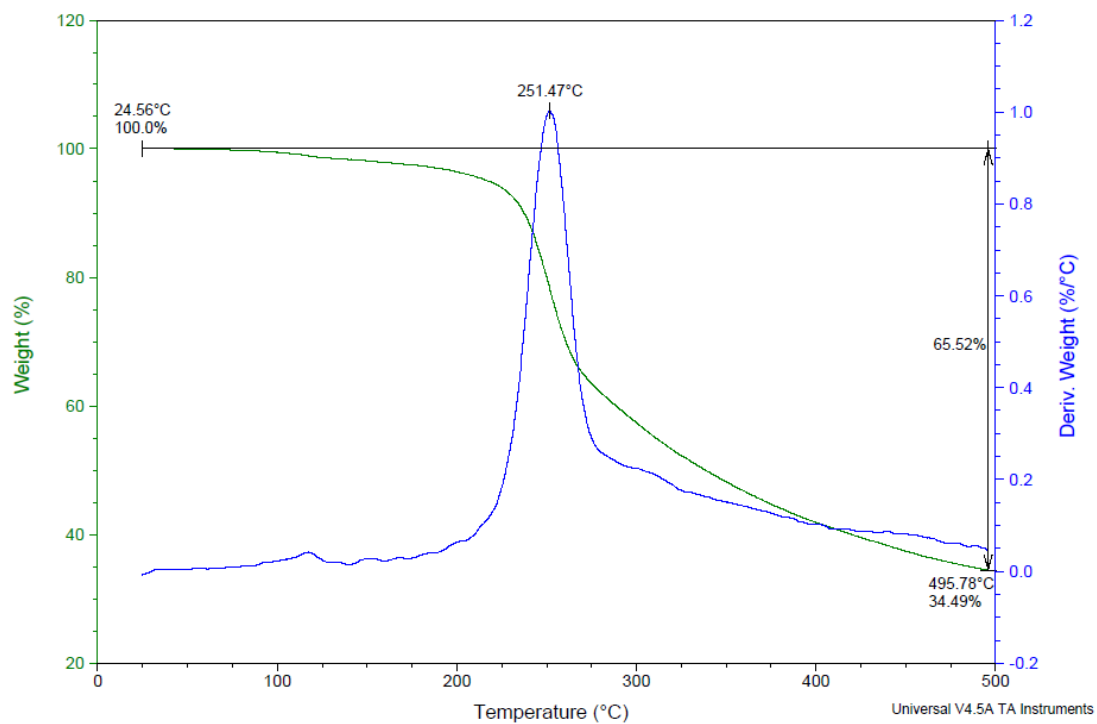


Obrázek 12 Termogravimetrická analýza (TGA) derivátu B/4096

Sample: B5057
Size: 3.1070 mg
Method: B5057
Comment: B5057

TGA

File: C:\...TGAB5057.001
Operator: LK
Run Date: 27-Mar-2018 12:38
Instrument: TGA Q50 V20.13 Build 39



Obrázek 13 Termogravimetrická analýza (TGA) derivátu B/5057