

# Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

## Institut für Chemie

**Fachgebiet:** *Chemie*

Betreuer: Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Peter Langer

Franziska Spruner von Mertz

(e-mail: franziska.spruner-von-mertz@uni-rostock.de)

## N-dotierte und $\pi$ -expandierte polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe

### Deutsche Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der  $\pi$ -Expansion und N-Dotierung polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe und der Möglichkeit sie als Werkzeuge zur Optimierung der Charakteristika der resultierenden Verbindungen einzusetzen. Die synthetische Realisierung sowie die Auswirkungen von jeweils  $\pi$ -Expansion und N-Dotierung auf die jeweiligen optischen und elektronischen Eigenschaften werden analysiert. Bei der Betrachtung der Eigenschaften stehen Absorptions- und Emissionsspektren sowie über DFT berechnete HOMO- und LUMO-Werte im Vordergrund. Anschließend werden polyaromatische Systeme mit gleichzeitiger N-Dotierung und  $\pi$ -Expansion untersucht. Dies veranschaulicht, wie die Kombination beider Methoden zu einer flexiblen Einstellung der Eigenschaften der resultierenden Verbindungen verwendet werden können. Zuletzt wird noch auf ein wichtiges Anwendungsgebiet, die organische Halbleitertechnik, eingegangen, in welcher N-dotierte und  $\pi$ -expandierte PAHs eine zunehmende Rolle spielen.

### Englisch Zusammenfassung

This work is comprised of the investigation of  $\pi$ -expansion and N-doping in polycyclic aromatic hydrocarbons as methods for fine-tuning of characteristics of the resulting compounds. The synthetic realization and the following impact of both N-doping and  $\pi$ -expansion on the optical and electronical properties are examined respectively. For the effect on properties mainly emission and absorption spectra as well as via DFT calculated HOMO- and LUMO-values are compared. Subsequently, simultaneous N-doping and  $\pi$ -expansion in polyaromatic systems are investigated. This demonstrates that the combination of both methods adds an additional layer to the fine-tuning of properties of the resulting compounds. Lastly, an important area of application – organic semiconductors – is mentioned, in which N-doped and  $\pi$ -expanded PAHs are featured increasingly.