

Chociaż aromatyczność jest jedną z najpopularniejszych i najlepiej zakorzenionych w intuicji chemicznej koncepcji, nie udało się jak dotąd znaleźć uniwersalnego sposobu jej ilościowej oceny. Wiadomo, że u podstaw tego zjawiska leży delokalizacja elektronowa (najczęściej chodzi tu o elektrony w nienasyconych cz. steczkach organicznych, ale obecnie znana jest już także i - i - aromatyczność, mająca duże znaczenie dla właściwości kompleksów metali przejściowych). Delokalizacja elektronowa wpływa na niemal wszystkie właściwości fizykochemiczne układów molekularnych, takie jak stabilność i reaktywność, geometrie równowagowe/kształt cz. steczek, właściwości spektroskopowe (widma UV/VIS, widma IR, widma NMR) i magnetyczne. Problemy pojawiają się przy próbach ilościowego ujęcia zjawiska aromatyczności – większość narzędzi stworzonych w tym celu bada zmiany jednej z wyżej wymienionych właściwości molekularnych. Niestety, zmiany te nie są do siebie proporcjonalne i stąd brak wyraźnej korelacji pomiędzy różnymi kwantyfikatorami aromatyczności. W ostatnich latach pojawiły się deskryptory aromatyczności bezpośrednio mierzące delokalizację elektronową w oparciu o wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych. Ich stosowanie jest jednak ograniczone, ze względu na duże obliczeniowe i materiałowe koszty. Ponadto, żadna z dotychczasowych metod nie umożliwia analizy zarówno globalnych (cała cz. steczka) jak i lokalnych (fragment molekularny) efektów stabilizacji aromatycznej w ramach jednego paradygmatu teoretycznego.

W naszej grupie badawczej opracowaliśmy nowy indeks aromatyczności oparty o tzw. gęstość elektronową wiązania zdelokalizowanych (EDDB – ang. electron density of delocalized bonds), który jest pozbawiony powyższych wad. Może służyć zarówno do szczegółowego zbadania lokalnej aromatyczności wybranego fragmentu w łańcuchu cz. steczki, jak i do spojrzenia „z lotu ptaka” na aromatyczność globalnego układu o nanoskopowych rozmiarach, takich jak fulereny, płatki grafenowe czy nanorurki węgla.

Zasadniczym celem projektu jest wykorzystanie metody EDDB w badaniach wpływu złoonych efektów delokalizacji elektronowej na strukturę i reaktywność układów molekularnych, które nie były dotychczas badane lub są przedmiotem dyskusji w literaturze naukowej. Metoda EDDB posłuży badaniom globalnej i lokalnej aromatyczności w poliacylenach, oligotiofenach i sprężonych closoboranach, analizie wpływu defektów strukturalnych na pierścienie i sferyczne aromatyczne fulereny oraz teoretycznemu opisowi wielokomponentowej aromatyczności w wybranych metalocyklach. Ważnym celem projektu jest również stworzenie oprogramowania, które umożliwi generowanie map EDDB oraz ilościowych analiz delokalizacji elektronowej w dowolnej cz. steczce.

Wyniki projektu przyczynią się do wyjaśnienia właściwości fizyko-chemicznych cz. steczek o szczególnym znaczeniu w katalizie, syntezie organicznej i badaniach materiałowych. W szczególności, wyniki projektu będą mogły wspomóc projektowanie nowych katalizatorów metatezy olefin oraz nowoczesnych materiałów magazynujących wodór, będą pomocne w interpretacji właściwości spektroskopowych oligotiofenów oraz dostarczą nowych metod usprawniających badanie mechanizmów syntezy fulerenów z ich aromatycznych prekursorów. Stworzone oprogramowanie pozwoli badać efekty stabilizacji aromatycznej w cz. steczkach o strukturze i rozmiarach stanowiących duże wyzwanie dla dotychczas używanych indeksów aromatyczności.