

Niniejszy projekt badawczy jest dedykowany syntezie organicznej, fotowoltaice oraz organicznej elektronice. Ta pierwsza dziedzina wiedzy i praktyki zajmuje się opracowywaniem nowych oraz rozwojem znanych metod otrzymywania związków chemicznych o oczekiwanych właściwościach. Domeną tej drugiej dziedziny (fotowoltaiki) jest konwersja energii słonecznej na prąd elektryczny, natomiast organiczna elektronika zajmuje się, m.in. konstrukcją „organicznych” diod – układów emitujących światło pod wpływem prądu. Fotowoltaika i organiczna elektronika to nowoczesne dziedziny wiedzy i techniki, z którymi wszyscy stykamy się na co dzień posługując się np. smartfonami, tabletami i różnego rodzaju odnawialnymi źródłami energii. Aby te rozliczne urządzenia i technologie z nimi związane mogły nam służyć i stale się rozwijać, niezbędny jest postęp w dziedzinie wytwarzania nowych materiałów, (np. polimerów przewodzących, materiałów emitujących światło) o oczekiwanych właściwościach, a więc postęp w syntezie organicznej. Stały postęp technologiczny wymaga prowadzenia badań naukowych zwanych podstawowymi, mających na celu między innymi projektowanie i otrzymywanie nowych materiałów i ich prekursorów (związków chemicznych) oraz wszechstronne zbadanie właściwości nowo wytworzonych półproduktów i produktów. Tego rodzaju badania mają charakter interdyscyplinarny, łącząc w sobie elementy chemii (chemii organicznej, katalizy, syntezy organicznej, chemii obliczeniowej), nauki o materiałach i fizyki (w tym fizyki wysokich ciśnień). Zasadniczym celem niniejszego projektu jest zsyntezowanie szeregu odpowiednio zaprojektowanych związków chemicznych mających wspólną właściwość (cechę strukturalną), a mianowicie będących pochodnymi perylenu - związku zbudowanego z kilku pierścieni aromatycznych. Dzięki obecności elementów strukturalnych pochodzących od perylenu oraz odpowiednich innych motywów strukturalnych możliwe będzie sterowanie ich właściwościami (czy wręcz dostrajanie ich do oczekiwań), np. przewodnictwem i zdolnością do emitowania światła o oczekiwanej barwie. Wśród związków, które zostaną otrzymane będą układy typu donor-akceptor, tzn. jeden fragment ich cząsteczek jest donorem ładunków elektrycznych, a drugi (ogólnie pozostałe elementy struktury) ich akceptorem. Będą też związki zdolne do wiązania metali (tzw. ligandy), szereg związków przewodzących prąd elektryczny (tzw. „sztucznych metali”) oraz przede wszystkim związki mające zdolność przetwarzania różnych form energii na światło. Układy te (związki chemiczne) będą syntezowane z wykorzystaniem najnowszych osiągnięć chemii i syntezy organicznej oraz chemii fizycznej (ze wspomaganiami ze strony fizyki i chemii teoretycznej), tj. dziedzin wiedzy i praktyki chemicznej pozwalających otrzymać efektywnie praktycznie dowolnie zaprojektowane struktury chemiczne. Planuje się mianowicie wykorzystać do syntezy opisanych powyżej związków jedną z reakcji cykloaddycji, zwaną od nazwisk odkrywców (wyróżnionych za to odkrycie nagrodą Nobla) reakcją Dielsa-Aldera. Reakcja ta, będąca jednym z fundamentów współczesnej chemii, w tym szczególnie syntezy organicznej pozwala na łączenie prostych substratów w bardziej złożone układy selektywnie (w zaplanowany sposób) i bez strat. Wszystkie planowane w projekcie reakcje Dielsa-Aldera zostaną zrealizowane pod wysokim ciśnieniem jako czynnikiem aktywującym substraty, bez udziału aktywatorów chemicznych - co czyni obraną strategię przyjazną środowisku. Pozwoli to na spektakularne zwiększenie szybkości reakcji, zwiększenie efektywności syntez oraz realizację przemian, które w zwykłych warunkach są nierealne. Reakcje termiczne (bez aktywacji wysokim ciśnieniem) także zostaną zrealizowane, ale będą to reakcje odniesienia (porównawcze). Otrzymane związki chemiczne, potencjalne nanomateriały emitujące światło oraz potencjalne „cegiełki” dla syntezy „sztucznych metali” zostaną następnie wszechstronnie przebadane gdy chodzi o ich właściwości fizykochemiczne (użyteczne dla przyszłych zastosowań). Co ważne, planuje się testowanie atrakcyjności otrzymanych związków w technologiach OLED i OPV oraz skonstruowane zostaną prototypowe urządzenia. Dzięki analizie wyników syntez, obliczeń teoretycznych, wszechstronnych badań właściwości oraz testów pre-aplikacyjnych uzyskana zostanie wiedza o relacjach struktura-reaktywność-oczekiwane właściwości. Wyniki projektu będą więc pomocne specjalistom z dziedziny chemii i technologii chemicznej, technologii materiałów i organicznej elektroniki chcących wykonać zaawansowane testy aplikacyjne (wytworzyć i zbadać gotowe urządzenia). Autorzy niniejszego, interdyscyplinarnego projektu reprezentują grupy badawcze z różnych obszarów chemii, fizyki i chemii materiałów. Realizacja projektu przyczyni się do rozwoju współpracy pomiędzy nimi oraz osobistego rozwoju naukowego każdego z uczestników projektu. Przede wszystkim jednak poszerzona zostanie wiedza odnośnie do cykloaddycji Dielsa-Aldera - jednej z fundamentalnych metod syntezy układów karbo- i heterocyklicznych jakie zna, rozwija i wszechstronnie wykorzystuje współczesna nauka, w szczególności chemia, oraz najnowocześniejsze technologie, w tym organiczna elektronika.