

## Popularnonaukowe streszczenie projektu

Barwniki posiadające sprzężenie krzyżowe (*ang.* cross-conjugated dyes) i ich pochodne są niezwykle ważną grupą związków organicznych, głównie ze względu na szerokie spektrum użyteczności: od wysokiej jakości pigmentów używanych do barwienia ubrań czy karoserii samochodów, przez elektronikę molekularną, aż do mikroskopii fluorescencyjnej. Od dwudziestu lat, barwniki te oraz ich proste pochodne przeżywają swój renesans ze względu na rozwój nowoczesnych dziedzin technologii takich jak fotonika i elektronika molekularna. Poszukując nowych materiałów o intrygujących właściwościach fotofizycznych grupa prof. Gryko opracowała metodę syntezy nieznanych dotąd barwników sprzężonych krzyżowo, opartych na rdzeniu dipirolonaftyrydynodionu (DPND) (Schemat 1). Wypadkowa reaktywność rdzenia DPND będzie determinowana zarówno poprzez obecność pierścieni pirolu, jak i poprzez obecność sprzężonych z tymi pierścieniami grup karbonylowych.

Podstawowym celem tego projektu jest poszerzenie wiedzy na temat do niedawna nieznanych, sprzężonych krzyżowo barwników na bazie DPND poprzez zbadanie zarówno ich niezwykle ciekawych właściwości optycznych oraz jak i możliwości, jakie daje bogata chemia pirolu i grupy karbonylowej. Planuje otrzymać, scharakteryzować i zbadać właściwości optoelektroniczne nowych, heterocyklicznych związków o horyzontalnie lub wertykalnie  $\pi$ -rozszerzonej powierzchni. Badania eksperymentalne będą połączone z obliczeniami kwantowo-mechanicznymi.

Kolejnym celem jest dogłębne poznanie zależności jaka istnieje pomiędzy strukturą otrzymanych związków, a zmierzonymi właściwościami optoelektronicznymi, a mianowicie chcielibyśmy zrozumieć w jaki sposób różne czynniki strukturalne (tzn. sposób rozszerzenia chromoforu, wprowadzenie heteroatomów) determinują daną właściwość związku, by móc w przyszłości projektować materiały na bazie badanego szkieletu, o z góry założonych właściwościach.

Zmiany z technologii, które zaszły w przeciągu ostatnich kilkunastu lat wyzwoliły zapotrzebowanie na nowe materiały. W szczególności skondensowane związki aromatyczne są potrzebne w takich dziedzinach ludzkiej działalności jak: organiczne diody emitujące światło (OLED), sztuczna fotosynteza (tzw. fotowoltaika), znaczniki fluorescencyjne etc. Technologie te mają zastosowanie w diagnostyce medycznej, telefonach komórkowych, aparatach fotograficznych, organicznych ogniwach słonecznych itd. Chociaż wiele takich substancji istnieje i to od dawna wciąż poszukuje się nowych związków chemicznych, o lepszych właściwościach.

Efektym końcowym projektu będzie otrzymanie nieistniejących do tej pory organicznych materiałów o potencjalnie interesujących właściwościach optoelektronicznych. Poprzez ich możliwe zastosowanie w elektronice molekularnej podwyższą one jakość i trwałość wyświetlaczy w takich urządzeniach jak aparaty cyfrowe i telefony komórkowe.