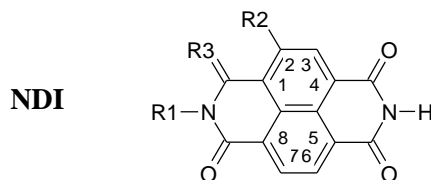


6×S dla Chiralnych Naftalenodiimidów: Synteza, Symulacje, Struktura, Spektroskopia, Spektroelektrochemia, Sensory

Naftalenodiimid (NDI, Schemat 1) jest ważnym rdzeniem strukturalnym nowoczesnych półprzewodników organicznych o małej masie cząsteczkowej. Pochodne NDI mogą wykazywać zarówno przewodnictwo elektronowe (n), dziurowe (p), jak i ambipolarne (n i p), a także elektro- i fotoluminescencję, efekty fotowoltaiczne i polowe. Dzięki korzystnym właściwościom fizykochemicznym NDI duże powierzchnie elastyczne mogą być nimi pokrywane przy użyciu różnych metod, w tym tak prostych jak drukowanie.



Schemat 1

Chiralność wnosi do chemii nowy wymiar. Enancjomery (stereoizomery, które są wzajemnymi odbiciami lustrzanymi) różnią się np.: aktywnością biologiczną, widmami chiralnoptycznymi, oddziaływaniami z innymi cząsteczkami chiralnymi, właściwościami organoleptycznymi itd. Chiralne leki mają coraz większe znaczenie ekonomiczne. Szacuje się, że w 2020 r. globalny rynek leków osiągnie wartość 1. biliona (10^{12}) dolarów rocznie. Co więcej, w tym czasie leki enancjomeryczne będą stanowić 95% wszystkich chiralnych leków. Przemysł farmaceutyczny wytwarza potrzebę rozwoju syntezy asymetrycznej, enancjoselektywnego rozdzielania i analizy, budowie enancjoselektywnych sensorów itp. W związku z tym chiralność jest bardzo ważna dla nowoczesnej chemii, farmacji i chemii medycznej i jest ogromna potrzeba:

- rozwoju czułych metod monitorowania cząsteczek chiralnych znajdujących się w różnych warunkach;
- budowy nowej klasy chiralnych półprzewodników;
- budowy nowych typów sensorów chiralnych.

Chiralne naftalenodiimidy były badane dość rzadko i raczej pod kątem tworzenia przez nie niezwykłych struktur supramolekularnych. W projekcie do rdzenia NDI będziemy dołączać chiralne podstawniki w różnych pozycjach. Oczekujemy, że w ten sposób wpłyniemy selektywnie na przewodnictwo elektronowe, dziurowe, oraz na właściwości ambipolarne, czyli przewodzenie obu nośników ładunku. Podstawniki będą dodatkowo wyposażane w grupy protonodonorowe lub protonoakceptorowe skonstruowane tak, aby skutecznie oddziaływały z molekularnymi celami sensorów. NDI wykazują dobrą fotoluminescencję i właściwości elektroluminescencyjne oraz dobrą odwracalność reakcji redoks. Możemy zatem konstruować zarówno dobrze działające, enancjoselektywne, sensory optyczne jak i elektrochemiczne.

Stawiamy sobie pięć celów projektu:

- (1) Syntezę nowych chiralnych NDI mających dobre półprzewodnictwo typu n, lub p, lub ambipolarne.
- (2) Wykonanie symulacji DFT przewodnictwa, spektroskopii elektronowej i spektroskopii chiralnoptycznej, oraz oddziaływań międzycząsteczkowych z chiralnymi molekularnymi celami sensorów.
- (3) Kompleksową analizę spektroskopową i dyfraktometryczną zsyntezowanych chiralnych NDI ze szczególnym naciskiem na zastosowanie technik chiralnoptycznych ECD, VCD i ROA.
- (4) Wykonanie pomiarów spektroelektrochemicznych ECD, UV-vis i EPR i badań woltamperometrycznych określających przewodnictwo, typ i odwracalność reakcji elektrodowych chiralnych NDI.
- (5) Konstrukcję enancjoselektywnych sensorów optycznych i/lub elektrochemicznych wybranych biomolekuł.

W tym celu: (a) opracujemy nowe metody syntezy związków chiralnych, (b) zastosujemy pomiary za pomocą metod spektroskopii chiralnoptycznej, które jeszcze nie były stosowane do badań chiralnych półprzewodników, (c) wykorzystamy dyfraktometrię rentgenowską, która pomoże nam określić supramolekularną strukturę nowych związków, (d) użyjemy metody elektrochemii typowe w badaniach półprzewodników organicznych, oraz (e) metody spektroelektrochemii, w tym dichroizm kołowy, który nigdy nie był wykorzystywany do badań chiralnych półprzewodników oraz (f) skonstruujemy nowe czujniki, elektrochemiczne i/lub optyczne, selektywne względem ważnych celów biologicznych.

Badania będą realizowane przez bardzo doświadczonych naukowców z Instytutu Chemii i Technologii Jądrowej, oraz z Uniwersytetu Jagiellońskiego, w Siedlcach i Warszawskiego oraz z Politechniki Śląskiej w Gliwicach.