

Rzeczony elektroniki wymaga rozszerzenia obszaru badawczego dotyczącego materiałów przydatnych do zastosowań w tej dziedzinie na przewodniki i półprzewodniki organiczne. Powinny się one cechować właściwościami porównywalnymi lub lepszymi z wykazywanymi przez tradycyjne materiały nieorganiczne, a przy tym dawać możliwości subtelnego dostrojenia do wymaganych warunków.

Zasadniczym celem projektu jest synteza i charakterystyka nowatorskich układów składających się z pierścieni norkorolu lub jego pochodnych jako elementów konstrukcyjnych. Norkorol to układ pierścieniowy złożony z czterech fragmentów heterocyklicznego pirolu. Dzięki zwartej konstrukcji wykazuje on wysoką trwałość, a jednocześnie jest podatny na rozmaite modyfikacje. Jego ważną cechą, jeśli idzie o właściwości elektronowe, jest obecność zdelokalizowanego na cały pierścień układu 16 elektronów typu π , która powoduje, że porfirynoid ten wykazuje cechę zwaną antyaromatycznością. Skutkiem takiej struktury elektronowej jest m.in. zasadnicza zmiana właściwości utleniająco-redukujących norkoroli w stosunku do makrocykli aromatycznych, takich jak porfiryny czy korole, tj. spadek wartości potencjałów utlenienia i wzrost potencjałów redukcji. Oznacza to, że norkorole zarówno przyjmują, jak i oddają elektrony łatwiej niż makrocykle aromatyczne. Zatem układy takie są potencjalnie atrakcyjnymi układami o charakterze przewodników organicznych. Co więcej, norkorole mogą być otrzymywane jako kompleksy metali z wysoką wydajnością na skalę rzędu gramów poprzez cyklizację odpowiednio zaktywowanych dipiryn opartą na rdzeniu metalicznym (templacie). Korzystną cechą pierścienia norkorolu jest wysoce selektywna reaktywność czterech spośród ośmiu pozycji β -pirolowych w reakcjach podstawienia pozwalająca w łatwy sposób modyfikować i dostrajać jego właściwości spektroskopowe i redoksove.

Cechą wyróżniającą układów badanych w bieżącym projekcie będzie występowanie więcej niż jednego centrum redoks. Głównym zadaniem będzie zbadanie komunikacji między podjednostkami zawierającymi te centra, oddziałującymi przez delokalizację gęstości elektronowej lub spinowej lub elektrostatycznie. Te czynniki bowiem kształtują zdolność układu wielocentrowego do pobierania bądź oddawania elektronów.

Zostaną również zbadane zdolności tych układów do tworzenia bardziej złożonych struktur poprzez wiązania kowalencyjne, koordynację jonu metalu lub inne rodzaje samoorganizacji. Planowane syntezy będą dotyczyły różnego rodzaju rozszerzenia układu, w tym tworzenie oligomerów o podjednostkach połączonych przez jedno lub więcej wiązanie kowalencyjne, poprzez koordynację jednej lub większej liczby podjednostek do jonu metalu oraz związki, w których oba te sposoby łączenia podjednostek występują jednocześnie. Szczególna uwaga będzie poświęcona właściwościom redoksowym otrzymanych układów. Zostanie zbadany wpływ rozmaitych cech strukturalnych występujących w podjednostkach, takich jak właściwości donorowo-akceptorowe lub steryczne podstawników na potencjały utleniania i redukcji, przerwę energetyczną HOMO-LUMO oraz komunikację między centrami redoksoowymi.

Planuje się zbadanie trzech typów układów: 1) kompleksy norkoroli z nieaktywnymi redoksovo jonami metali we wnęce koordynacyjnej (Ni^{2+} , Pd^{2+}), zawierające podstawniki redoksovo czynne w pozycjach *mezo* makrocykla, takie jak ferrocen czy aromatyczne węglowodory wielopierścieniowe, 2) związane kowalencyjnie układy dimeryczne o pojedynczych lub podwójnych wiązaniach między podjednostkami, jak również oligomery ze skondensowanymi pierścieniami pirydyny w formie mostków oraz 3) oligomery z mostkami metalicznymi, gdzie jon metalu skoordynowany jest przez donor wprowadzony do pierścienia jednostki monomerycznej lub dimerycznej. W grupie układów ze skondensowanymi mostkami pirydynowymi będą również związki zawierające inne centra aktywne redoksovo, takie jak porfiryny, dipiryny czy aromatyczne grupy wielopierścieniowe.

Oprócz charakterystyki spektroskopowej i elektrochemicznej tych układów, będą podejmowane próby wyodrębnienia i charakterystyki produktów ich jedno- i wieloelektronowego utlenienia i/lub redukcji w celu określenia ich stanu spinowego i właściwości magnetycznych.

Do charakterystyki nowych układów będą stosowane różne metody, w tym wielojądrowy NMR, UV-vis-NIR, EPR oraz dichroizm kołowy. Wiodącą techniką niespektroskopową będzie elektrochemia (cykliczna i pulsu różnicowego).