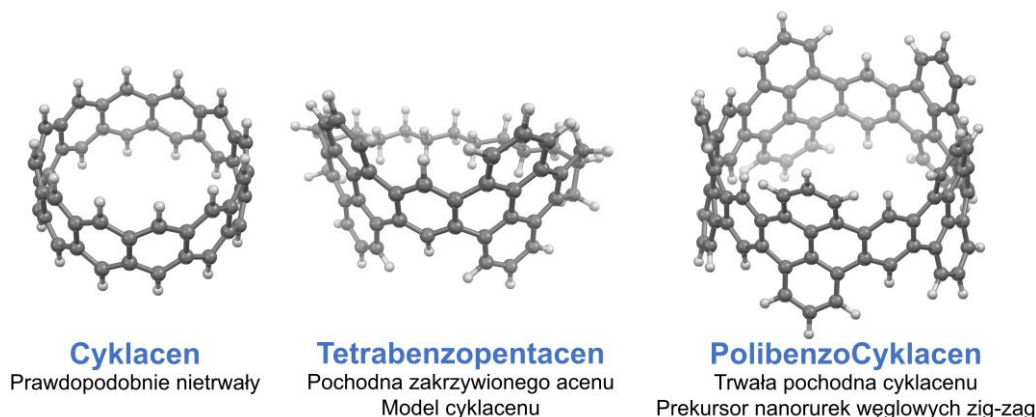


Postęp dokonany w syntezie organicznej pozwolił w ostatnich latach na otrzymanie związków chemicznych, których synteza jeszcze niedawno wydawała się praktycznie niemożliwa. Dobrym przykładem są tu tzw. nanopierścienie czy nanopasy węglowe, związki złożone z atomów węgla i wodoru, które w kształcie przypominają pierścienie o średnicach rzędu nanometrów, a które z powodzeniem zostały zsyntezowane w przeciągu ostatnich kilkunastu lat. Nanopierścienie/nanopasy są szczególnie interesujące ze względu na fakt, że strukturalnie stanowią pojedyncze segmenty nanorurek węglowych. Co więcej, uważa się, że związki te mogą posłużyć jako prekursorzy do oddolnej syntezy wysokiej jakości nanorurek o jednolitej strukturze i właściwościach, co miałyby ogromne znaczenie dla rozwoju nowoczesnych technologii, w szczególności elektroniki organicznej.

Niestety, jak do tej pory zsyntezowano jedynie nanopierścienie i nanopasy będące prekursorami nanorurek typu „armchair” lub niektórych nanorurek chiralnych. Pomimo licznych prób, nie udało się dotychczas otrzymać prekursorów nanorurek typu zig-zag – tzw. cyklacenów. Wynika to z faktu, że cyklaceny, cykliczne analogi acenów, zgodnie z przewidywaniami teoretycznymi powinny być związkami skrajnie niestabilnymi. Ich syntezę dodatkowo utrudnia brak odpowiednich metod syntetycznych, które zdolne byłyby przekształcić odpowiednie nienapężone cykliczne prekursorzy w wysoce napężony układ cyklacenu.

Celem niniejszego projektu jest opracowanie skutecznych reakcji zwiększających napężenie układu acenowego, pozwalających na syntezę stabilnych pochodnych cyklacenu. Badania te zostaną przeprowadzone przy użyciu zakrzywionych analogów acenów jako uproszczonych, małowymiarowych modeli odpowiednich cyklacenów. W celu stabilizacji zakrzywionego układu acenu oraz cyklacenu, docelowe struktury zostaną zaopatrzone w dodatkowe skondensowane pierścienie benzenowe. Wybór obiecujących ścieżek syntetycznych zostanie wstępnie dokonany w oparciu o wyniki modelowania teoretycznego różnych reakcji przy użyciu Teorii Funkcjonału Gęstości. Najbardziej obiecujące reakcje zostaną wykorzystane najpierw w syntezie zakrzywionych pochodnych acenów z krzywizną wymuszoną poprzez mostek alkilowy. Jeśli synteza ta się powiedzie, zgromadzona wiedza i opracowana metodyka zostanie użyta w syntezie trwałej pochodnej cyklacenu.



Obydwa typy produktów docelowych, zakrzywione aceny oraz cyklaceny, stanowią niezwykle interesujące związki, które powinny wykazywać ciekawe właściwości fotofizyczne, elektrochemiczne oraz supramolekularne. Z tego względu, właściwości otrzymanych pochodnych zostaną wnikliwie przebadane i porównane z ich płaskimi odpowiednikami.

Realizacja projektu wpłynie na rozwój metodologii syntezy napężonych układów aromatycznych i makrocyclicznych, a ponadto pozwoli znacząco poszerzyć wiedzę na temat właściwości zakrzywionych policyklicznych węglowodorów aromatycznych. Otrzymanie stabilnych pochodnych cyklacenu będzie ważnym krokiem na drodze do oddolnej syntezy nanorurek węglowych typu zig-zag. Osiągnięcie to będzie miało ogromne znaczenie dla rozwoju nowoczesnych nanotechnologii.