

Synteza niskowymiarowych polimerów organicznych z wykorzystaniem aktywnych katalitycznie powierzchni metali jest obecnie jednym z najintensywniej rozwijających się obszarów nanotechnologii i katalizy heterogenicznej. Dzięki szerokim możliwościom manipulowania składem chemicznym jednostek budulcowych-monomerów, w tym poprzez selektywne wprowadzanie atomów i grup funkcyjnych, możliwe jest obecnie w otrzymywanie połączeń kowalencyjnych (2D polimery) o ściśle kontrolowanej budowie i zasięgu uporządkowania. Jednym z najczęściej stosowanych typów monomerów są w tym przypadku halogenowe pochodne cząsteczek organicznych o zróżnicowanej geometrii. Powierzchniowa synteza polimeru z udziałem halogenowych pochodnych (np. w reakcji Ullmanna) poprzedzona jest zazwyczaj tworzeniem się metaloorganicznych prekursorów, których topologia zdeterminowana jest przez kształt monomeru oraz liczbę i rozmieszczenie w nim chlorowcowych podstawników. Ponieważ struktura labilnego prekursora dziedziczona jest przez polimer powstający pod wpływem dalszego ogrzewania, zrozumienie relacji monomer-prekursor ma kluczowe znaczenie dla projektowania i optymalizacji nowych połączeń kowalencyjnych. Jak dotąd cel ten osiąga się dzięki syntezie, selektywnej funkcjonalizacji i doświadczalnemu testowaniu potencjalnych monomerów, co często jest zadaniem czasochłonnym, wymaga zaangażowania dużych środków i zastosowania specjalnych warunków (np. ultra wysoka próżnia).

Celem projektu jest skonstruowanie i walidacja ogólnego narzędzia teoretycznego pozwalającego na szybkie określenie przydatności halogenowych pochodnych policyklicznych węglowodorów aromatycznych (PAH) w powierzchniowej syntezie organicznych polimerów kowalencyjnych. Badania w naszym projekcie polegać będą na komputerowym modelowaniu labilnych struktur metaloorganicznych (prekursorów) towarzyszących powierzchniowej syntezie polimerów 2D o programowalnej architekturze. Głównym zadaniem projektu jest zbadanie wpływu czynników takich jak rozmiar, geometria i skład chemiczny cząsteczki-budulca (liczba i rozmieszczenie atomów chlorowca) na morfologię otrzymywanych układów metaloorganicznych. Równorzędnym celem badań jest określenie sposobów efektywnego programowania oddziaływań koordynacyjnych w rozważanych układach powierzchniowych w celu otrzymywania superstruktur o zróżnicowanej kontrolowanej periodycznej i aperiodycznej budowie. Naszym celem jest sformułowanie ogólnych reguł pozwalających na projektowanie niskowymiarowych polimerów kowalencyjnych z udziałem liniowych i nieliniowych monomerów typu PAH o odpowiednio dobranym rozmieszczeniu podstawników halogenowych. Wykorzystując symulacje komputerowe techniką Monte Carlo pragniemy zweryfikować hipotezę zakładającą, że poprawne prognozowanie architektur cząsteczkowych omawianego typu może odbywać się za pomocą metod teoretycznych nie wymagających szczegółowej wiedzy na temat struktury atomowej/elektronowej.

Zasadniczą przesłanką do podjęcia naszych badań jest rosnące znaczenie praktyczne metod wytwarzania niskowymiarowych organicznych struktur kowalencyjnych, które mogą być alternatywą dla konwencjonalnych materiałów przewodnikowych i półprzewodnikowych wykorzystywanych w (nano)optoelektronice. Rezultaty planowanych badań dadzą odpowiedź na szereg pytań związanych z relacją: cząsteczka budulca – metaloorganiczny prekursor i dostarczą wskazówek odnośnie projektowania nowych architektur molekularnych o unikatowych właściwościach. Superstruktury cząsteczkowe, które zamierzamy odkryć mogą zapoczątkować/ukierunkować nowe trendy badawcze w powierzchniowej syntezie polimerów o niespotykanych dotąd cechach.