

Niniejszy projekt badawczy jest poświęcony syntezie funkcjonalizowanych nanografenów, które należą do supernowoczesnych nanomateriałów znajdujących zastosowanie w fotowoltaice, organicznej elektronice, medycynie – lista zastosowań tej klasy materiałów jest bardzo długa. Występujące w powyższym zdaniu terminy "grafen" i "nano" są dziś na ustach wszystkich, interesujących się najnowszymi osiągnięciami nauki i techniki – odmieniane przez przypadki występują w kontekście wielu najnowszych technologii, bez których trudno wyobrazić sobie naszą cywilizację. Grafen to płaska, ultra-cienka struktura zbudowana z atomów węgla połączonych ze sobą jak w plastrze miodu, zaś "nano" określa wielkość cząstek materii, np. kawałków grafenu (1-5 nm). Z kolei "funkcjonalizowane" oznacza posiadające elementy strukturalne, np. łańcuchy węglowodorowe, chromofory – nadające całej strukturze wymagane cechy (np. zdolność do emisji światła o określonej barwie, rozpuszczalność). Celem projektu jest stworzenie nowych możliwości w syntezie funkcjonalizowanych nanografenów, w tym dotowanych heteroatomami (np. azotu, siarki), z wykorzystaniem strategii APEX (Annulative Pi-Expansion) i bottom-up, czyli rozszerzania układu wyjściowego, zaczynając od prostych, a zmierzając do bardzo złożonych pi-sprzężonych aromatycznych struktur. Kluczowym decydującym o jego innowacyjności narzędziem realizacji celu projektu jest nowa, dotąd nieznaną, reakcja typu domino pomiędzy perylenem lub jego pochodnymi a 1,4-dyarylo-1,3-dyami. Na wspomniane "domino" składa się cykloaddycja Dielsa-Aldera diynu do wnęki perylenu (lub jego pochodnej) z następczą cykloizomeryzacją. Produkty tego domina będą poddawane dalszym transformacjom (np. kolejnym cykloaddycjom, dehydrokondensacji). Finalnie otrzymane zostaną funkcjonalizowane nanografeny o ściśle zaplanowanej i kontrolowanej strukturze oraz oczekiwanych właściwościach. Dzięki tym właściwościom będą atrakcyjne dla organicznej elektroniki i fotowoltaiki. Domeną fotowoltaiki jest konwersja energii słonecznej na prąd elektryczny (ogniwa słoneczne), natomiast organiczna elektronika zajmuje się m.in. konstrukcją „organicznych” diod – układów emitujących światło pod wpływem prądu. Fotowoltaika i organiczna elektronika to nowoczesne dziedziny wiedzy i techniki, z którymi wszyscy stykamy się na co dzień, posługując się np. smartfonami, tabletami i różnego rodzaju odnawialnymi źródłami energii. Aby te rozliczne urządzenia i technologie z nimi związane mogły nam służyć i stale się rozwijać, niezbędny jest postęp w dziedzinie wytwarzania nowych materiałów (np. polimerów przewodzących, materiałów emitujących światło) o oczekiwanych właściwościach, a więc postęp w syntezie organicznej. Stały postęp technologiczny wymaga prowadzenia badań naukowych zwanych podstawowymi, mających na celu między innymi projektowanie i otrzymywanie nowych materiałów i ich prekursorów (związków chemicznych) oraz wszechstronne zbadanie właściwości nowo wytworzonych produktów. Tego rodzaju badania mają charakter interdyscyplinarny, łącząc w sobie elementy chemii, nauki o materiałach i fizyki. Dzięki obecności w nanografenach elementów strukturalnych pochodzących od perylenu oraz odpowiednich innych motywów strukturalnych, możliwe będzie sterowanie ich właściwościami (czy wręcz dostrajanie ich do oczekiwań) np. przewodnictwem i zdolnością do emitowania światła o oczekiwanej barwie. Realizacja projektu zawiera także etap *chemistry in silico* (chemia w krzemie czyli obliczenia teoretyczne) – dzięki wynikom obliczeń możliwe będzie racjonalne planowanie struktur do syntez oraz planowanie warunków prowadzenia reakcji. Otrzymane związki chemiczne, potencjalne nanomateriały emitujące światło lub przetwarzające je w prąd elektryczny oraz potencjalne „cegiełki” dla syntezy „sztucznych metali” zostaną następnie wszechstronnie przebadane, gdy chodzi o ich właściwości fizykochemiczne (użyteczne dla przyszłych zastosowań). Co ważne, planuje się również testowanie atrakcyjności otrzymanych związków w technologiach – np. OLED, ogniwach słonecznych; skonstruowane zostaną prototypowe urządzenia. Dzięki analizie wyników syntez, obliczeń teoretycznych, wszechstronnych badań właściwości oraz testów preaplikacyjnych, uzyskana zostanie wiedza o relacjach struktura-reaktywność-oczekiwane właściwości. Wyniki projektu będą więc pomocne specjalistom z dziedziny chemii i technologii chemicznej, technologii materiałów i organicznej elektroniki, chcących wykonać zaawansowane testy aplikacyjne (wytworzyć i zbadać gotowe urządzenia). Autorzy niniejszego interdyscyplinarnego projektu reprezentują grupy badawcze z różnych obszarów chemii, fizyki i chemii materiałów. Realizacja projektu przyczyni się do rozwoju współpracy pomiędzy nimi oraz osobistego rozwoju naukowego każdego z uczestników projektu. Przede wszystkim jednak poszerzona zostanie wiedza odnośnie syntezy, właściwości i możliwości aplikacyjnych funkcjonalizowanych nanografenów – grupy nowoczesnych materiałów molekularnych jakie zna, rozwija i wszechstronnie wykorzystuje współczesna nauka, w szczególności chemia, oraz najnowocześniejsze technologie, w tym organiczna elektronika.