

Pomimo wyjątkowych właściwości, jednościenne nanorurki węglowe (SWCNT) i wielościenne nanorurki węglowe (MWCNT) zmagają się z niską hydrofilowością, trudnym przetwarzaniem, niską kompatybilnością z większością matryc polimerowych, czy niskimi wydajnościami fluorescencji, które ograniczają wachlarz ich zastosowań i sprawiają, że nie mogą zostać wykorzystane w niektórych obszarach praktycznych zastosowań. W związku z tym, powierzchnia nanorurek węglowych jest często modyfikowana (funkcjonalizowana) przez odpowiednie grupy funkcyjne pozwalające na wprowadzanie związków organicznych i nieorganicznych w celu poprawienia ich właściwości, a tym samym właściwości hybrydowego układu zwiększając ich potencjał aplikacyjny. Funkcjonalizacja kowalencyjna za pomocą cząsteczek może dostrajać fizykochemiczne właściwości nanomateriałów węglowych na drodze synergii i wprowadzać całkowicie nowe, które nie są obecne w nieprzetworzonych nanorurkach węglowych. Przykładowo funkcjonalizowane SWCNT są używane jako ważny element transparentnych, zginalnych wyświetlaczy do smartfonów, podczas gdy atramenty przewodzące na bazie MWCNT pozwalają na drukowanie ścieżek przewodzących na powierzchni wyrobów tekstylnych umożliwiając badania nad inteligentnymi ubraniami. Dlatego też nowe reakcje i protokoły funkcjonalizacji w celu poprawienia i modyfikacji właściwości CNT są potrzebne, a ich rozwój może się przyczynić do zrealizowania jeszcze bardziej zaawansowanych zastosowań i projektów.

Jedną z reakcji, która potencjalnie pozwala kontrolować właściwości elektryczne i optyczne nanorurek węglowych jest cykloaddycja [2+1] organicznych nitrenów, która wykazuje unikalną regioselektywność zależną od średnicy. Przykładowo, dla nanorurek węglowych o średnicy większej, niż 2,4 nm przewidywane jest selektywnie tworzenie adduktu o konfiguracji zamkniętej (closed-configuration), który wykazuje zaburzenia w lokalnym przewodnictwie, podczas gdy nanorurki o mniejszej średnicy będą tworzyć addukt o konfiguracji otwartej (open-configuration), który lokalne przewodnictwo zachowuje. Zastosowanie organicznych nitrenów, a szczególnie nitrenów fenyłowych, ze względu na obecność pierścienia fenyłowego, może pozwolić na modyfikację właściwości elektronowych adduktu o konfiguracji otwartej, ze względu na zachowanie i rozszerzenie układu skoniugowanego wiązań nanorurki węglowej na podstawniki w pierścieniu fenyłowym. Oba addukty mogą mieć unikalny wpływ na emisję fluorescencji w bliskiej podczerwieni półprzewodnikowych jednościennych nanorurek węglowych, która jest bardzo wrażliwa na wszelkie zmiany strukturalne i elektronowe w nanorurce węglowej. Właściwość ta może być wykorzystana w kwantowym transferze informacji, czy też biomedycynie, a narzędzie w postaci cykloaddycji [2+1] nitrenów może mieć istotny wkład w rozwój tych technologii. Innym, nieodkrytym dotąd aspektem cykloaddycji [2+1] nitrenów jest potencjalna możliwość wprowadzania skomplikowanych cząsteczek organicznych na powierzchnię SWCNT, co może być wykorzystane przy opracowaniu nowych metod terapeutycznych i diagnostycznych w nanomedycynie. Wyniki naszych prac rozszerzą spektrum funkcjonalizacji SWCNT o nową reakcję i grupę związków pozwalających na projektowanie właściwości elektronowych i optycznych nanorurek węglowych.

Badania zaplanowane w projekcie są istotną częścią badań nad modyfikacją właściwości elektronowych, optycznych i fizycznych nanorurek węglowych poprzez dobrze zdefiniowaną chemiczną funkcjonalizację. Wyniki projektu mogą przyczynić się do rozwoju nowych diod emitujących podczerwień wykorzystywanych w technologiach wojskowych, czy nowych sond fluorescencyjnych do obrazowania medycznego w II oknie optycznym bliskiej podczerwieni.