

Na początku XX wieku, kiedy odkryto mutagenne działanie pirenu, wydawało się, że los wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych (PAH) został przesądzony. Jednak odkrycie fulerenów i nanorurek węglowych, a także organicznych tranzystorów polowych (OFET), organicznych diod elektroluminescencyjnych (OLED) itp. sprawiło, że wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne stały się interesującymi obiektami badań. Ich heterocykliczne analogi posiadające π -rozszerzoną strukturę również przeżywają renesans ze względu na wysoką ruchliwość nośnika ładunku, co czyni te związki niezwykle przydatnymi w elektronice organicznej.

Organiczne diody elektroluminescencyjne i powiązane z nimi technologie zajmują dominującą pozycję w dziedzinie technologii wyświetlaczy. Dalszy postęp w tym zakresie jest jednak ograniczony dostępnymi obecnie materiałami. Dlatego niezwykle ważne są zaprojektowanie i synteza cząsteczek o lepszych właściwościach optycznych. Heliceny to PAH charakteryzujące się specyficzną orientacją sąsiadujących pierścieni aromatycznych, dzięki czemu cząsteczka nie jest płaska. Systemy karbo[n]helicenowe charakteryzują się samoistnymi właściwościami chiroptycznymi, takimi jak spolaryzowana kołowo luminescencja. Te właściwości mają kluczowe znaczenie dla dalszego rozwoju OLED i powiązanych technologii. Oczywiście jest, że dalszy postęp w tej dziedzinie można osiągnąć jedynie poprzez badania dłuższych helicenów i multi-helicenów, zawierających ugrupowania, które pozwalają na pełną kontrolę nad właściwościami optoelektronicznymi. Metody syntetyczne umożliwiające dostęp do tych cząsteczek nie istnieją, a ich opracowanie jest kluczowym celem niniejszego wniosku grantowego. Naszym celem jest otrzymanie helikalnych, sprzężonych, aromatycznych cząsteczek opartych na heterocyklicznych blokach budulcowych, posiadających dotychczas nieznaną, dla struktur zakrzywionych, kombinację właściwości, takich jak duże wydajności kwantowe fluorescencji, emisja światła czerwonego i w bliskiej podczerwieni itp.

Ze względu na cele projektu, nasze badania zostaną podzielone na trzy zadania. Pierwszym etapem proponowanych badań będzie opracowanie syntezy podwójnych helicenów, z dwoma typami heterocyklicznych jednostek budulcowych syntetyzowanych równolegle, aby zminimalizować czynnik ryzyka. Kluczowym etapem syntezy helicenów będzie reakcja fotochemiczna, tj. proces wymagający użycia fotonów. Następnie przeprowadzimy syntezę długich helicenów, obejmujących bogate w elektrony pirolopirole jako donory. Z upływem czasu złożoność syntezy będzie wzrastać, prowadząc do multi-helicenów i diastereo-selektywnej syntezy zakrzywionych architektur. Finalnie przeprowadzone zostaną podstawowe badania fotofizyczne, a następnie zaawansowane badanie kluczowych parametrów. Wszystkie uzyskane układy zostaną dokładnie zbadane w ostatnim etapie, co pozwoli określić wpływ ich struktury na właściwości fotofizyczne.

Oczekuje się, że uzyskane wyniki zmienią chemię syntetyczną helicenów, a jednocześnie pozwolą opracować sposoby kontroli parametrów fotofizycznych silnie zakrzywionych cząsteczek aromatycznych.

Długoterminowy wpływ na społeczność naukową obejmuje pogłębione zrozumienie zależności pomiędzy strukturą helikalnych cząsteczek aromatycznych a ich właściwościami optycznymi. Odpowiedź na pytanie, w jakich warunkach takie związki mogą wykazywać silną fluorescencję i emisję światła spolaryzowanego kołowo (CPL), w celu poprawy wydajności wyświetlaczy opartych na OLED oraz umożliwienia dodatkowej funkcjonalności wyświetlaczy stereoskopowych (wyświetlaczy 3D), wpłynie na rozwój lepszych materiałów służących do wytwarzania organicznych diod elektroluminescencyjnych. Ponieważ wytworzenie światła, a jednocześnie wykorzystanie światła słonecznego są niezbędne dla naszego życia, cele tego projektu mają ogromne znaczenie.