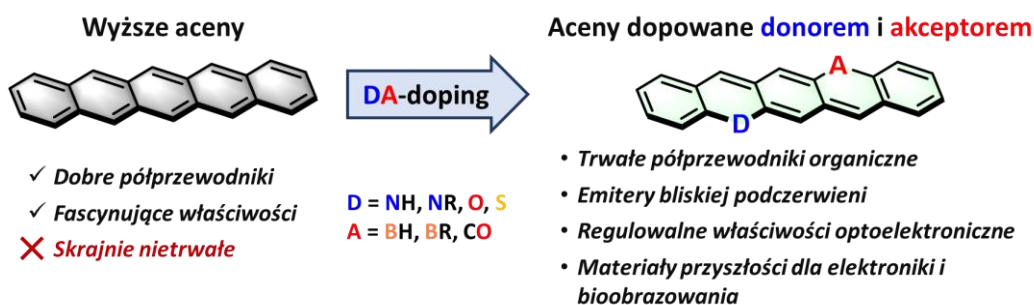


Aceny i cyklaceny dopowane atomami donora i akceptora

Wzrastająca świadomość na temat globalnych zagrożeń środowiskowych skłoniła naukowców do poszukiwania nowych, bardziej ekologicznych alternatyw dla wielu technologii związanych z produkcją, konwersją i magazynowaniem energii. Ponadto, poszukuje się zamienników dla tradycyjnej elektroniki opartej na krzemie i metalach ciężkich, ponieważ w ramach ich cykli życia generowana jest duża ilość zanieczyszczeń oraz obarczone są wysokim śladem węglowym. W celu rozwiązania tych problemów, naukowcy zwrócili uwagę ku związkom zawierającym układy naprzemiennych wiązań pojedynczych i podwójnych, tzw. molekułom o sprzężonym układzie elektronów π . Aceny są szczególnie interesującą grupą π -sprzężonych związków aromatycznych ze względu na ich unikalne właściwości fotofizyczne i półprzewodnikowe, które czynią je obiecującymi kandydatami do zastosowań w elektronice organicznej, np. w organicznych tranzystorach polowych (OFET) i organicznych diodach elektroluminescencyjnych (OLED). Co więcej, aceny wykazują zdolność konwersji energii poprzez anihilację tryplet-tryplet oraz rozszczepienie stanu singletowego, czyli procesy, które mogą w przyszłości posłużyć do zwiększenia wydajności paneli fotowoltaicznych. Niestety, wyższe aceny charakteryzują się niezwykle wysoką reaktywnością i są skrajnie nietrwałe, co obecnie uniemożliwia ich rzeczywiste zastosowanie. Aby w pełni wykorzystać potencjał tych cząsteczek, niezbędny jest skuteczny sposób stabilizacji układu acenowego.

W niniejszym projekcie proponujemy nowatorską metodę stabilizacji wyższych acenów oraz ich cyklicznych kuzynów, cyklacenów, poprzez dopowanie ich atomami donora i akceptora w starannie wybranych pozycjach w taki sposób, że uzyskane analogi zachowywałyby kluczowe strukturalne i elektroniczne zalety wyjściowego acenu, jednocześnie wykazując wysoką trwałość zarówno w roztworze, jak i w ciele stałym. Oprócz trwałości, nowe analogi acenów dopowane donorem i akceptorem powinny charakteryzować się wysoce korzystnymi właściwościami optoelektronicznymi, co jest szczególnie istotne z perspektywy ich ewentualnych zastosowań: wąska przerwa energetyczna, absorpcja/emisja światła w bliskiej podczerwieni oraz regulowalna różnica energii pomiędzy stanem singletowym i trypletowym.



Projekt obejmuje kilka powiązanych ze sobą zagadnień. Badania rozpoczną się od syntezy prostych analogów pentacenu z dopowaniem typu donor-akceptor, co potwierdzi słuszność koncepcji naszej nowej metody stabilizacji acenów. Zdobyte doświadczenie zostanie następnie wykorzystane w będącej większym wyzwaniem syntezie analogów wyższych acenów zawierających jedną lub kilka par donor-akceptor, natomiast otrzymanie stabilnego dopowanego cyklacenu będzie przełomowym osiągnięciem koronującym realizację projektu. Prace syntetyczne będą wspierane poprzez obliczenia kwantowo-mechaniczne oraz wyniki charakteryzacji eksperymentalnej pierwszych otrzymanych związków docelowych, co pomoże w optymalizacji strukturalnej dalszych produktów celem uzyskania pożądanych cech fizycznych i właściwości optoelektronicznych.

Pomyślna realizacja tego projektu doprowadzi do opracowania nowych materiałów π -sprzężonych, o możliwych zastosowaniach w elektronice organicznej, gdzie mogłyby służyć jako półprzewodniki w organicznych tranzystorach polowych lub jako materiały fotoaktywne w bateriach słonecznych. Ponadto, związki te dzięki fluorescencji w zakresie bliskiej podczerwieni mogą być obiecującymi znacznikami do użytku w bioobrazowaniu i jako sensory fluorescencyjne. Ich synteza i charakteryzacja pomoże w zrozumieniu relacji pomiędzy strukturą i właściwościami organicznych układów π -sprzężonych, co ułatwi przyszłe prace nad projektowaniem nowych, wydajnych półprzewodników organicznych i barwników fluorescencyjnych. Co więcej, stabilne analogi cyklacenów o dopowaniu donor-akceptor mogą okazać się przydatne w rozpoznaniu supramolekularnym.