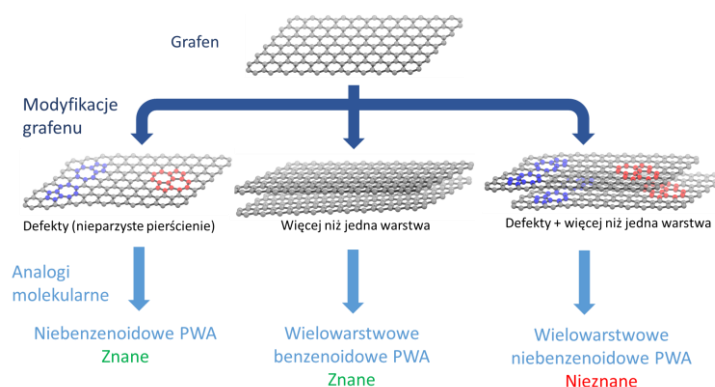


Niebenzenoidowe policykliczne węglowodory aromatyczne jako molekularne modele zdefektowanego grafenu

PI: Bartłomiej Pigulski, Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski

Sprężone układy składające się wyłącznie z atomów węgla są jednymi z najważniejszych materiałów przyszłości i grafen jest najważniejszym członkiem tej rodziny. Jednakże jednowarstwowy benzenoidowy (zawierający tylko pierścienie sześcioczątonowe) grafen jest tutaj tylko początkiem. Strukturalne modyfikacje grafenu dostarczają nieograniczone możliwości tworzenia materiałów posiadających nowe i użyteczne właściwości. Tego typu modyfikacjami mogą być np. defekty w postaci nieparzystych pierścieni, użycie kilka warstw zamiast jednej lub więcej niż jedna modyfikacja w tym samym czasie (Rys. 1).



Rysunek 1. Dostrajanie właściwości grafenu: defekty w postaci nieparzystych pierścieni, kilka warstw grafenu, zdefektowany kilkuwarstwowy grafen.

Jednakże **wpływ różnych typów topologicznych defektów na fizykochemiczne właściwości grafenu pozostaje słabo zbadany**. Jest to przyczyną, dla której molekularne analogi grafenu są w ostatnim czasie gorącym i intensywnie eksplorowanym tematem w chemii organicznej. Tego typu molekularne analogi z precyzyjnie zdefiniowaną strukturą są nazywane policyklicznymi węglowodorami aromatycznymi (PWA) lub nanografenami. PWA zawierające defekty w postaci nieparzystych pierścieni lub benzenoidowe nanografeny tworzące kilkuwarstwowe układy były już raportowane, natomiast jak do tej pory **wielowarstwowe kompleksy supramolekularne zdefektowanych PWA nie są znane**.

Celem niniejszego projektu jest wypełnienie tej luki. PWA zawierające defekty strukturalne w postaci azulenu (Rys. 1, niebieskie defekty) zostały wybrane ze względu na ich ogromny potencjał w elektronice organicznej. Pierwszym etapem projektu będzie **opracowanie nowych ścieżek syntetycznych** prowadzących do policyklicznych węglowodorów aromatycznych zawierających w swojej strukturze motyw strukturalny azulenu. Ponadto docelowe molekuly będą wykazywały nietypową absorpcję w zakresie bliskiej podczerwieni pomimo raczej małego rozmiaru π -sprężonego szkieletu. Docelowe molekuly zostały **starannie opracowane w kontekście ich molekularnej topologii** co pozwoli na kontrolowane tworzenie **wielowarstwowych kompleksów supramolekularnych** w roztworze i ciele stałym. Tego typu struktury supramolekularne będą **pierwszymi molekularnymi odpowiednikami zdefektowanego wielowarstwowego grafenu** oraz mogą być postrzegane jako droga dalszego dostrajania właściwości niebenzenoidowych PWA.

Głębokie zrozumienie wpływu defektów na właściwości grafenu jest krytyczne z punktu widzenia jego zastosowań i będzie się przyczyniało do racjonalnego projektowania materiałów organicznych.