

Tak wiele zostało już zrobione, ale tak wiele jeszcze trzeba zrobić - to główna myśl, która towarzyszy naukowcom każdego dnia, a wynika ona z ciągle rosnącego zapotrzebowania na nowe technologie. To właśnie to zapotrzebowanie próbuje wyprzedzić o krok tempo rozwoju. Aby dotrzymać kroku, My - naukowcy zobligowani jesteśmy do tego, aby poszukiwać nowych rozwiązań technologicznych, które będą wydajniejsze, tańsze i szeroko dostępne dla ludzi. Remedium, które jest w stanie rozwiązać powstające zapotrzebowanie to materiały dedykowane tzw. organicznej elektronice. Należą do niej między innymi takie materiały i technologie takie jak diody elektroluminescencyjne (OLEDs - organic light emitting diodes), ogniwa słoneczne (OPVs - organic photovoltaics, DSSC - dye-sensitized solar cell) oraz organiczne tranzystory polowe (OFETs - organic field-effect transistors). Dla przeciętnego człowieka są to te materiały, z których wykonane są m.in. smartfony, telewizory LED, komputer, czy też panele fotowoltaiczne, które coraz częściej montowane są na naszych dachach lub w naszych ogródkach. Materiały, z których zbudowane są te technologie charakteryzują się pewnymi specyficznymi właściwościami fotofizycznymi, dzięki czemu emitują lub absorbują one światło w oczekiwanym zakresie barw z oczekiwaną wydajnością.

Taką też interesującą grupą związków są pochodne azapirenow, czyli związków chemicznych, które są izosterelem pirenu, czyli molekuly otrzymanej zwykle poprzez wyodrębnienie z sadzy podczas niecałkowitego spalania węgla kamiennego. Pochodne pirenu charakteryzują się intensywną niebieską barwą świecenia, co więcej są one odpowiednimi substratami do kolejnych reakcji, w wyniku których można otrzymać inne molekuly o innych oczekiwanych, właściwościach. Mając to na uwadze, przedmiotem niniejszego projektu są innowacyjnie podstawione w różnej konfiguracji azapireny zawierające w obszarze non-K (pozycje 1, 3, 6, 8) oraz pozycjach węzłowych (pozycje 2, 7) atom(y) azotu, które ze względu na duże wyzwanie syntetyczne, jak dotąd zostały nieznacznie poznane. Dzięki nowoczesnemu podejściu do syntezy chemicznej i użyciu najnowszej wiedzy w tym zakresie możliwe będzie otrzymanie oczekiwanych pochodnych azapirenow. Warto również wspomnieć, że realizacja niniejszego projektu pozwoli także na sprawdzenie możliwości prowadzenie reakcji w sposób inny niż ten, który powszechnie stosowany jest przez naukowców. W tym zakresie reakcje będą prowadzone w ogrzewaniu mikrofalowym, co pozwoli na zdecydowane skrócenie czasu reakcji, zmniejszenie ilości użytych rozpuszczalników, zredukowania ilości powstających odpadów, a co najważniejsze zwiększenie wydajności reakcji. Jest to postępowanie z myślą o naszym środowisku naturalnym, aby chemia jak najmniej negatywnie wpływała na otaczającą nas przyrodę, jest to tzw. „Green Chemistry”. Związki te same w sobie będą wykazywały interesujące właściwości fotofizyczne, jak również będą mogły zostać użyte do syntezy innych grup związków chemicznych, takich jak np. związki koordynacyjne, gdzie odpowiednio zaprojektowane pochodne azapirenow będą pełniły funkcję NNN-cyklometalujących ligandów.

Wszystkie związki docelowe, jak i również związki pośrednie będą szeroko scharakteryzowane w zakresie właściwości optycznych, elektrochemicznych i termicznych. Ponadto dodatkowym ważnym aspektem jest sprawdzenie możliwości generowania emisji światła białego, co pozostaje wyzwaniem ze względu na konieczność uzyskania fluorescencji obejmującej obszar widzialny (400-700 nm) przy wzbudzeniu molekuly w zakresie długości fali bliskiego ultrafioletu. Tak zaplanowane badania pozwolą na wyciągnięcie wniosków jak poszczególne modyfikacje struktury wpływają na właściwości związków docelowych. Ta wiedza tj. znajomość relacji struktura - właściwości, pozwoli nam w kolejnych etapach modyfikować, czyli zmieniać poszczególne elementy lub je rozbudowywać co stwarza szerokie możliwości świadomego wpływania na właściwości syntezowanych struktur co skutkować będzie molekułami efektywniejszymi od tych już znanych, stosowanych w organicznej elektronice. Wszystkie badania eksperymentalne będą wspierane przez obliczenia teoretyczne, metodami kwantowo-mechanicznymi, takimi jak DFT (density functional theory) oraz TD-DFT (time-dependent density functional theory). Dzięki współpracy z naukowcami zajmującymi się badaniami materiałowymi najbardziej obiecujące związki zostaną przetestowane. Tylko takie komplementarne podejście do przedstawionego problemu badawczego może w pełni rozwiązać jego założenia i pozwolić na osiągnięcie zaplanowanych celów, a przez to w przyszłości polepszyć nasze życie.