

Renesans zainteresowania policyklicznymi węglowodorami aromatycznymi (PWA) wynika zarówno z chęci zbadania relacji pomiędzy ich strukturą a właściwościami, jak również ze wzrostu znaczenia tych związków w nowoczesnych dziedzinach technologii takich jak fotonika i elektronika molekularna. Niebagatelne znaczenie ma również poszukiwanie nowych materiałów fluorescencyjnych oraz zainteresowanie grafenem, fullerenami i nanorurkami. Wadami PWA są zarówno ograniczenia związane z ich regioselektywną funkcjonalizacją jak również problemy z ich foto- i termostabilnością.

Rozwiązaniem może być konstrukcja analogów PWA w oparciu o azotowe rusztowania heteroaromatyczne o obniżonej gęstości elektronowej. Takie sztywne układy aromatyczne domieszkowane azotem są obecnie przedmiotem znacznego zainteresowania badawczego również ze względu na możliwość tworzenia przez nie różnorodnych interakcji z innymi cząsteczkami. Materiały te łatwo ulegają protonowaniu w środowisku kwasowym, a także solwatowaniu z różnymi jonami metali. Oba te procesy modyfikują strukturę elektronową materiału, a tym samym jego właściwości fluorescencyjne. Postęp w tym zakresie jest jednak ograniczony ze względu na trudności syntetyczne umożliwiające tworzenie tych materiałów o ściśle zdefiniowanej strukturze.

Kluczowym aspektem wniosku grantowego jest opracowanie metody ich syntezy w oparciu o najnowsze techniki syntetyczne oparte na mechanosyntezie. Koncentrują się one na przemianach wiązań kowalencyjnych w cząsteczkach chemicznych indukowanych siłą mechaniczną powstałą podczas mielenia reagentów w odpowiednim reaktorze kulowym. Mechanochemia stanowi zatem czwarty sposób wywoływania reakcji chemicznych, uzupełniając reakcje termiczne w płynach, fotochemię i elektrochemię. Przyciąga ona coraz większą uwagę ze względu na krótki czas prowadzenia reakcji chemicznych, oszczędność energii a także wysokie wydajności tworzących się produktów. Oprócz tych praktycznych korzyści, synteza mechanochemiczna z wykorzystaniem mielenia kulowego może potencjalnie zapewnić ekscytujące możliwości dostępu do dużych obszarów dotychczas niezbadanej przestrzeni chemicznej, w której reaktywność związków chemicznych może różnić się od tej zachodzącej w konwencjonalnych roztworach.

Strategia syntezy będzie opierała się na syntezie N-domieszkowanych związków o strukturze polifenylowej o różnych rozmiarach i kształtach, które następnie będą planaryzowane w młynie kulowym w procesie zwanym cyklodehydrogenacją. W ostatnim etapie wszystkie uzyskane materiały zostaną dokładnie zbadane, co pozwoli określić wpływ N-domieszkowania węglowodorów aromatycznych na ich właściwości fotofizyczne.

Wymiernym celem projektu będzie odkrycie nowych, niespotykanych dotąd architektur aromatycznych o unikalnych właściwościach fotofizycznych. Oczekuje się zwiększonej stabilności nowo powstałych struktur w porównaniu z ich analogami węglowymi ze względu na ich rosnący charakter z niedoborem elektronów. Włączenie jednostek pirydynowych lub innych azyn do układu poliaromatycznego o π -rozszerzej strukturze zapewni unikalną rodzinę przestrzajalnych wewnętrznych fluoroforów, w których zmiany w polaryzacji elektronowej, solwatacji i koordynacji przełożą się na duże zmiany ich właściwości fotofizycznych. Doprowadzi to do znaczącego wkładu w rozwój użytecznych chemosensorów, a także nowych materiałów emitujących światło. Szczególny nacisk w tym aspekcie będzie położony na konstrukcję odpowiednich kompleksów z metalami przejściowymi, w celu uzyskania lepszych emiterów NIR OLED. Emisja w tym zakresie jest całkowicie niewidoczna dla ludzi, jednak wytworzone materiały mogą być przydatne w zastosowaniach związanych z komunikacją światłowodową.