

Związki organiczne są na ogół izolatorami, ponieważ wszystkie elektrony w cząsteczkach są sparowane, więc nie istnieją wolne elektrony, które mogłyby przewodzić prąd (rodniki, czyli cząsteczki z niesparowanymi elektronami, są z reguły niestabilne, jeśli chodzi o wykorzystanie ich jako materiały). Od 1970 roku odkrywano i badano określone klasy związków organicznych (małe cząsteczki lub ich kompleksy, a następnie polimery  $\pi$ -skoniugowane) w celu „przewyciężenia historycznej reguły” i wykazania, że związki organiczne mogą być półprzewodnikami, a nawet wykazywać przewodnictwo typu metalicznego. Otworzyło to drzwi do nowej ery technologicznej „elektroniki organicznej”. Po kilkudziesięciu latach intensywnych badań akademickich, półprzewodniki organiczne zaczęły mieć wpływ na sektor komercyjny (urządzenia elektroluminescencyjne (OLED), tranzystory polowe (OFET), organiczne ogniwa słoneczne (OSC), lasery, urządzenia elektro- i fotochromowe, baterie i superkondensatory, pamięć, przełączniki i urządzenia logiczne, czujniki i bioczujniki, nanotechnologie, itp.). Wiele zaawansowanych technologicznie urządzeń opartych na organicznych materiałach elektronicznych otacza nas jako produkty konsumenckie (telewizory OLED, wyświetlacze w telefonach komórkowych i laptopach, ekrany dotykowe, czujniki jednorazowego użytku, itp.).

Takie materiały zwykle posiadają rozbudowany system orbitali  $\pi$ -elektronowych, które tworzą chmurę zdelokalizowanej gęstości elektronowej rozciągającą się na całą cząsteczkę, nadając jej określone właściwości elektroniczne i optyczne. Wiele różnych klas cząsteczek aromatycznych/heteroaromatycznych o różnej symetrii cząsteczkowej, kształcie, rozmiarze, zdolności do oddawania lub przyjmowania elektronów (z/do) ich układu  $\pi$ -elektronowego zostało wykorzystanych jako elementy budulcowe do projektowania organicznych materiałów elektronicznych. Pozwala to nie tylko kontrolować (lub dostrajać) procesy przenoszenia ładunku i/lub elektronu w takich układach (a co za tym idzie ich właściwości pod kątem określonych zastosowań elektronicznych), ale także konstruować materiały o różnej wymiarowości (1D, 2D, 3D). Duże zainteresowanie i wyzwanie stanowi rozszerzenie sprzężenia w takich układach od jednego wymiaru (jak w „klasycznych” sprzężonych polimerach) do architektur gwiaździstych i dwuwymiarowych (jak w grafenie).

Azatrianguleny, klasa cząsteczek o symetrii  $C_3$  z centralnym atomem azotu związanym z 3 pierścieniami benzenowymi, które są połączone ze sobą przez atomy C lub O, tworząc płaską strukturę, reprezentują fascynujące rdzenie do konstruowania szerokiej gamy sprzężonych architektur w kształcie gwiazdy, na ich podstawie opracowano wiele materiałów  $\pi$ -funkcyjnych.

Głównym celem tego projektu jest opracowanie syntetycznych metodologii projektowania azatriangulenów z mostkami  $-\text{SO}_2-$ ,  $-\text{S}-$  i  $-\text{NH}-$  /  $-\text{NR}-$  (zadanie niełatwe, ale bardzo wymagające). Po osiągnięciu sukcesu w takiej syntezie będzie można opracować szeroką gamę materiałów sfunkcjonalizowanych opartych na tych nowatorskich rdzeniach azatriangulenowych. Kluczową ideą proponowanego projektu jest to, że zmieniając charakter mostków z grup silnie elektronoakceptorowych ( $\text{SO}_2$ ) na grupy silnie elektrondonorowe (NR), możemy dostroić graniczne energie orbitali w rdzeniach azatriangulenowych w niezwykle szerokim zakresie. Inną ważną cechą jest szeroka paleta możliwych dalszych funkcjonalizacji (przy atomach C pierścieni benzenowych lub przy mostkach azotowych) do konstruowania na ich podstawie gwiaździstych materiałów  $\pi$ -funkcyjnych (od układów małych cząsteczkowych po kowalencyjne szkielety organiczne/sprzężone polimery 2D), w celu uzyskania pożądaných właściwości elektronicznych dla różnych zastosowań elektronicznych. W związku z tym planujemy konstruowanie materiałów transportujących dziury na bazie azatriangulenów z mostkami  $-\text{NR}-$  oraz materiałów przenoszących ładunek na bazie azatriangulenów z mostkami  $-\text{SO}_2-$  i  $-\text{NR}-$ . W szczególności przewidujemy istnienie wielorezonansowego wewnątrzcząsteczkowego transferu ładunku w funkcjonalizowanych związkach  $\text{ATA-3SO}_2$  i spodziewamy się otrzymać (na ich podstawie) wydajne materiały z termicznie aktywowaną opóźnioną fluorescencją (TADF) do zastosowań OLED. Wreszcie, planujemy przeprowadzić szeroko zakrojone badania fotofizyczne, elektrochemiczne i strukturalne zsyntetyzowanych cząsteczek, aby uzyskać głęboki wgląd w ich struktury elektronowe i  $\pi$ -funkcyjność, aby poszerzyć naszą wiedzę akademicką na temat tej fascynującej klasy cząsteczek.