

Typ projektu: **OPUS-21**

Numer umowy: UMO-2021/41/B/ST5/03221

W kierunku zerowej przerwy energetycznej i nadprzewodnikowych sprzężonych wielowymiarowych polimerów

Głównym celem proponowanego projektu jest synteza nowych monomerów amidynowych, a następnie - polimerów o strukturze uporządkowanej w trzech wymiarach, charakteryzujących się występowaniem pasma wzbronionego o wartości zbliżonej do zera. Monomery zostaną zsyntetyzowane na drodze reakcji odpowiednich aromatycznych bezwodników lub dibeżwodników z diaminami. Przykładowo, zastosowanie aromatycznych *meta*- i *para*-diamin umożliwi tworzenie liniowych polimerów z jednostkami bis(diimidowymi); zaś zastosowanie *orto*-diamin powoduje wytworzenie polimeru drabinkowego z pięcioczłonowymi pierścieniami heterocyklicznymi (układy odniesienia). My zaś proponujemy syntezę monomerów, wytwarzanych na drodze kondensacji z aromatycznych dibeżwodników i 1,8-naftalenodiaminy, co skutkuje obecnością w strukturze monomeru jednostki perimidyny (1H-benzo[de]chinazolina), która jak odkryliśmy, bierze udział w procesie utleniającego sprzęgania cząsteczek monomeru do struktury polimeru. Ponadto proponujemy zastosowanie dibeżwodników funkcjonalizowanych także w rdzeniu aromatycznym jednostkami ulegającymi polimeryzacji (np. tiofen, pirol, EDOT, itp.), co ostatecznie umożliwi usztywnienie struktury dwuwymiarowej. Ponadto, zwiększone interakcje dalekiego zasięgu, z udziałem m.in. cząsteczki perimidyny, mogą sprzyjać organizacji supramolekularnej w trzecim wymiarze. Reasumując, właściwy dobór bezwodnika i aminy może skutkować wytworzeniem odpowiedniego monomeru, dającego następnie polimer o płaskim dwuwymiarowym szkielecie i znacznych oddziaływaniach dalekiego zasięgu między warstwami 2D polimeru, co ostatecznie może zapewnić wytworzenie nowego materiału organicznego o wysokiej przewodności elektrycznej i niskiej szerokości pasma zabronionego.

Toward zero band gap and superconducting conjugated multidimensional polymers

The main objective of the proposed project is the synthesis of new amidine monomers and then - polymers with a three-dimensional structure, characterized by the occurrence of a band gap with a value close to zero. Monomers will be synthesized by the reaction of appropriate aromatic anhydrides or dianhydrides with diamines. For example, the use of aromatic *meta*- and *para*-diamines will allow the formation of linear polymers with bis(diimide) units; use of *ortho*-diamines results in the formation of a ladder polymer with five-membered heterocyclic rings (reference systems). However, we propose the synthesis of monomers produced by annulation of aromatic dianhydrides and 1,8-naphthalenediamine, which results in the presence of perimidine (1H-benzo(de)quinazoline) in the monomer structure, which we discovered to be involved in oxidative coupling of monomer to polymer structure. In addition, we propose the use of dianhydrides functionalised also in aromatic core by polymerizable units (e.g. thiophene, pyrrole, EDOT, etc.), which will ultimately enable stiffening of two-dimensional structure. In addition, increased long-range interactions, involving, inter alia, the perimidine units may promote supramolecular organization in a third-dimension. In summary, the proper choice of anhydride and amine reagents can result in the formation of a suitable monomer, also resulting in a polymer with a planar two-dimensional backbone and significant long-range interactions between the polymeric 2D layers, which can ultimately ensure the production of a new organic material with high electrical conductivity and a low bandgap.