

## Streszczenie

XXI wiek to czas prężnego rozwoju wszelakich dziedzin nauki związanych z innowacyjnym pozyskiwaniem i przetwarzaniem energii, wśród których na szczególną uwagę zasługuje organiczna elektronika. W dobie walki ze zmianami klimatycznymi, połączonej z galopującym zapotrzebowaniem na energię, niezaprzeczalnie istotne jest poszukiwanie i wykorzystywanie efektywnych źródeł zrównoważonej energii. Należy mieć wszakże świadomość, że tylko niektóre źródła energii są w stanie dostarczać bardzo dużych mocy, zaś pozostałe (np. organiczna elektronika) stanowią źródła komplementarne. Aby sprostać wymaganiom stawianym przez dzisiejszy świat nauki, chemicy-syntetycy stale oferują dostęp do szeregu nowych związków chemicznych, wykazujących pożądane właściwości, które mogą pełnić rolę funkcjonalnych materiałów organicznych. Niezwykle istotną rolę w tym kontekście odgrywają pochodne perylenu – wielopierścieniowego węglowodoru aromatycznego (WWA), składającego się z pięciu skondensowanych ze sobą pierścieni aromatycznych. Interesujące właściwości fizykochemiczne perylenu i jego pochodnych, jak również możliwość modyfikacji ich struktury poprzez przyłączenie do rdzenia aromatycznego różnych motywów powoduje, że związki te mogą być rozpatrywane jako obiecujące materiały molekularne, szczególnie w dziedzinie organicznej elektroniki.

Jedną z możliwych dróg syntezy pochodnych perylenowych jest anulacyjna  $\pi$ -ekspansja (APEX) rdzenia aromatycznego, dzięki której w jednym kroku można otrzymać nowy związek, bogatszy o co najmniej jeden pierścień aromatyczny. Doskonałe narzędzie w tym procesie stanowi jedna z fundamentalnych reakcji chemii organicznej – cykloadycja Dielsa-Aldera (CDA). Niniejsza praca poświęcona jest syntezie nowych funkcjonalizowanych nanografenów opartych na strukturze perylenu otrzymywanych *via* reakcje CDA.

W ramach przeprowadzonych badań wykonano szereg eksperymentów, mających na celu dobór najbardziej korzystnych warunków cykloadycji różnych dienofili, zarówno do perylenu, jak i jego pochodnych. W literaturze naukowej znane są reakcje cykloadycji Dielsa-Aldera do wnętrza perylenodiimidów. Natomiast, gdy chodzi o inne pochodne perylenu, takie jak m.in. opisywane w ramach niniejszej pracy doktorskiej pochodne perylenotetraestrów (PTE) tudzież aminoperylenów, wiedza na temat możliwości zastosowania CDA do ich rozbudowy w pozycji *bay* jest ograniczona. W związku z powyższym, praca przedstawia możliwości rozszerzenia rdzenia tego typu pochodnych perylenowych na drodze reakcji anulacyjnej  $\pi$ -ekspansji (APEX) wraz z dogłębną analizą wyników obliczeń kwantowo-chemicznych. Obliczenia te

dostarczyły wielu istotnych informacji na temat barier energetycznych prowadzonych reakcji oraz relacji struktura-właściwości nowo uzyskanych funkcjonalizowanych nanografenów. W pracy otrzymano związki dedykowane potencjalnym zastosowaniom, tj. do wytwarzania urządzeń takich jak OLED-y czy ogniwa słoneczne. Równie ważny efekt przeprowadzonych badań to nowa wiedza z obszaru chemii i syntezy organicznej – w tym m.in. cykloaddycji Dielsa-Aldera do wnętrza perylenu i jego pochodnych, strategii APEX oraz regioselektywności substytucji elektrofilowej oraz samej cykloaddycji.

