



## O delokalizacji $\pi$ w nienasyconych strukturach węglowych: właściwości optyczne i zachowanie magnetyczne

Miłosz Pawlicki

[pawlicki@chemia.uj.edu.pl](mailto:pawlicki@chemia.uj.edu.pl)

<http://mjplab.org/>

Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński  
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

Silnie skoniugowane pochodne bazujące na szkieletach węglowych to intensywnie badana grupa związków w kierunku optymalizacji ścieżek syntetycznych niezbędnych do efektywnego tworzenia ściśle zaplanowanych struktur z wpisanymi właściwościami skorelowanymi z ich odmiennym kształtem oraz rozmiarami. Rozbudowana koniugacja bazująca na atomach węgla o hybrydyzacji  $sp^2$  pozwala na precyzyjne dostrajanie obserwowanych właściwości optycznych czy magnetycznych ściśle skorelowanych z dostępnym rozmiarem chmury  $\pi$  a ta umożliwia również stabilizację niesparowanych elektronów w tym w formie dirodników. Włączenie heteroatomu stanowi osobną opcję pozwalającą na modulację obserwowanych właściwości. Atom boru stanowi bardzo istotny element w tym zestawie,<sup>[1]</sup> ze względu na swój charakter i kwasowość Lewisa, która znacząco zakłóca równą dystrybucję elektronów  $\pi$ ,<sup>[2,3]</sup> ale również pozwala na ustabilizowanie pochodnych antyaromatycznych.<sup>[4,5]</sup> To szerokie spektrum możliwości badawczych (zarówno podstawowych, jak i wprowadzających opcję aplikacyjną) wpisanych w konstrukcje zbudowane z podjednostek acenowych/heteroacenowych wymaga bardzo dokładnego zaplanowania końcowych szkieletów o zaprogramowanym zachowaniu.

Precyzyjna strategia otrzymywania hybryd łączących w swojej strukturze motyw acenowy/heteroacenowy dodatkowo modulowany przez wprowadzenie określonego defektu predefiniowanego do wiązania małych kationów daje ściśle zaprojektowane pochodne. Ich specyficzna konstrukcja pozwala na post-syntetyczne zmiany w ramach lokalnej reaktywności, która wpływa na globalne zachowanie,<sup>[6]</sup> ale także na zmiany w obrębie delokalizacji przełączając efekty lokalne na globalne<sup>[2-5]</sup> a również stabilizację charakteru (di)rodnikowego.<sup>[7,8]</sup> Wszystkie te aspekty będą stanowić podstawę prezentowanego materiału koncentrując się na zachowaniu chmury  $\pi$  w uzyskanych pochodnych zawierających trójdentny defekt pozwalający na post-syntetyczną modulację obserwowanego charakteru<sup>[9]</sup> a także prowadzącej do dynamicznej równowagi stabilizującej stan otwartopowłokowy, a udokumentowane na bazie spektroskopowej wspartej analizą teoretyczną.

[1] K. Dzieszkowski, *et al. Mater. Chem. Front.* **2022**, *6*, 3306-3311

[2] W. Stawski, *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 10946-10950

[3] K. Bartkowski, *et al. Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, *60*, 9063-9070

[4] A. Dutta, *et al. Org. Lett.* **2021**, *23*, 9436-9440

[5] K. Wypych, *et al. Org. Lett.* **2022**, *24*, 4876-4880

[6] J. Klajn, *et al. Chem. Commun.* **2019**, *55*, 4558-4561

[7] P. Banachowicz, M. Das, *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202400780

[8] K. Dzieszkowski, *et al. ChemPlusChem.*, **2025**, *accepted*

[9] M. Farinone, *et al. Chem. Commun.* **2022**, *58*, 7269-7272