

PROJEKT Umowa nr UMO-2017/27/B/ST5/00149

prof. zw. dr hab. Bogdan Marciniak

„Nowe funkcjonalizowane heterosilseskwioksany jako prekursorzy materiałów hybrydowych - synteza i charakterystyka” Umowa nr UMO-2017/27/B/ST5/00149

"New functionalized heterosilsesquioxanes as precursors of hybrid materials - synthesis and characterization" Contract no. UMO-2017/27 / B / ST5 / 00149

STRESZCZENIE PROJEKTU

1. Cel prowadzonych badań/hipoteza badawcza

Silseskwioksany to wielofunkcyjne organiczno-nieorganiczne związki hybrydowe o sztywnym i dobrze zdefiniowanym szkielecie (zbudowanym z jednostek **Si-O-Si**) o rozmiarach nanometrycznych, wykazujące wysoką stabilność termiczną oraz posiadające możliwość dołączenia rozmaitych grup funkcyjnych do atomu krzemu należącego do szkieletu (np. układy kubiczne, drabinowe lub niecałkowicie skondensowane). Ogólnym celem tego projektu jest synteza nowej rodziny pochodnych silseskwioksanów, tak zwanych heterosilseskwioksanów (głównie o strukturze kubicznej, otrzymanej przez zastąpienie poszczególnych atomów Si atomami innych pierwiastków z grup 13-15 układu okresowego (**E**), głównie **B, Ge, Sn, P, Sb** wbudowanych w szkielet lub bezpośrednio z nim połączonych wiązaniem **Si-O-E**), a także modyfikowanie klatkowych silseskwioksanów w celu otrzymania związków sfunkcjonalizowanych heteroatomami. Celem projektu jest zaprojektowanie funkcjonalizowanych heterosilseskwioksanów jako prekursorów nowych, hybrydowych (nano)materiałów nieorganiczno-organicznych z wykorzystaniem przemian chemicznych z udziałem grup funkcyjnych przyłączonych do heteroatomów.

2. Zastosowana metoda badawcza/metodyka

Nowe molekularne heterosilseskwioksany (**HeteroPOSS**) oraz silseskwioksany zmodyfikowane do sfunkcjonalizowanych pochodnych heteroatomów (**HeteroPOSS-related**) będą podstawą otrzymania oligomerów, polimerów i kopolimerów o różnych zaprojektowanych architekturach, stanowiących nową grupę hybrydowych nieorganiczno-organicznych premateriałów, wykazujących unikalne właściwości. Zasadniczym punktem tych syntez jest wprowadzenie organicznych grup funkcyjnych do szkieletu oraz zbadanie ich reaktywności w tworzeniu hybrydowych polimerów z wykorzystaniem selektywnych i wydajnych procesów stechiometrycznych (substytucja nukleofilowa), oraz przede wszystkim, reakcji katalitycznych takich jak hydrosililowanie, metateza krzyżowa olefin oraz metalujące sprzęganie i wielu innych, łącznie z tymi odkrytymi przez zespół poznański. Należy podkreślić, że wszystkie związki otrzymane w ramach tego projektu będą posiadały reaktywne grupy w pozycjach

terminalnych, co umożliwi syntezę związków molekularnych oraz makromolekularnych zawierających różne heteroatomy.

3. Wpływ spodziewanych rezultatów na rozwój nauki, cywilizacji, społeczeństwa

Badania w ramach projektu otworzą nowe możliwości w nauce o materiałach związane z tym, że otrzymane materiały nie będą oparte jedynie na krzemie ale również na innych pierwiastkach bloku p. Wprowadzenie nowych pierwiastków wpłynie na zmianę właściwości fizykochemicznych, co może doprowadzić do utworzenia nowej gałęzi chemii funkcjonalizowanych heterosiloksydów. Związki zsyntezowane w ramach tego projektu oraz wyniki analiz przeprowadzonych w celu wyznaczenia ich właściwości będą stanowić podstawę dalszego rozwoju chemii hybrydowych materiałów nieorganiczno-organicznych.

4. Określenie w jakim stopniu i zakresie projekt dotyczy pionierskich badań naukowych, w tym interdyscyplinarnych, ważnych dla rozwoju nauki, wykraczających poza dotychczasowy stan wiedzy

Projekt jest oparty na pionierskiej wizji opracowania strategii syntetycznej, która doprowadzi do uzyskania oryginalnych heterosiloksydów o zdefiniowanej strukturze jako prekursorów materiałów hybrydowych nowej generacji. Zaplanowane badania interdyscyplinarne wykorzystają możliwości modyfikacji różnych parametrów określających ich właściwości i mogą zainicjować gwałtowny rozwój wytwarzania takich materiałów o unikalnych właściwościach i nowych zastosowaniach.

ABSTRACT

1. Research project objectives/Research hypothesis

Silsesquioxanes are recognized as versatile organic-inorganic hybrids with rigid and defined SiO framework and nanometric dimensions, high thermal stability and varied range of functionalized organic groups attached to silicon atom incorporated in silicon framework (e.g. cubic, ladders or incompletely condensed systems). The general aim of this project is to synthesize a new family of silsesquioxane derivatives called – **heterosilsesquioxanes** (mainly cubic by replacement of particular Si-atoms with other elements from 13-15 groups (**E**) mainly **B, Ge, Sn, P, Sb** incorporated or directly attached to the **Si-O-E** bond as well as modified polyhedral silsesquioxanes to compounds functionalized with the heteroatoms. The goal of the project is to design **functionalized heterosilsesquioxanes** as precursors of new (nano) hybrid inorganic-organic materials on the basis of chemical transformations with the functional groups at the heteroatoms.

2. Research project methodology

The novel molecular heterosilsesquioxanes (**HeteroPOSS**) as well as silsesquioxanes modified to the functionalized heteroatom derivatives (**HeteroPOSS-related**) will be the basis for the preparation of oligomers, polymers and copolymers with different but designed architecture, which constitute a novel group of hybrid inorganic-organic (pre)materials characterized by unique properties. The crucial point of the syntheses is introduction of organic functional groups onto the scaffold as well as determination of their reactivity in formation of hybrid polymers using very selective and efficient both stoichiometric but mostly catalytic procedures such as nucleophilic substitution, hydrosilylation, cross-metathesis as well as metallative coupling and others including those revealed by the Poznan team. It needs to be emphasised that all molecules synthesized in the project will have reactive groups in terminal positions allowing the formation of molecular and especially macromolecular compounds with atoms of different elements in their structure. Extension of the knowledge in the subject of chemistry and properties of these new compounds and materials is essential for further development of this completely new research field. Incorporation of different p-block elements (B, Ge, Sn, P, Sb) into the material matrix will affect their thermal, mechanical or chemical properties and this impact will be also investigated in the project.

3. Expected impact of the research project on the development of science, civilization and society

The project will open a new gate to material science focused not only on silicon but also on other p-block elements, which significantly influence a lot of physicochemical properties and will generate a new branch of chemistry of functional heterosilsesquioxanes. The compounds synthesized within this project as well as all analyses carried out for determination of their properties will be a foundation for further extensive development of hybrid organic – inorganic materials.

4. Extent and scope of the project with regards to the pioneering nature of the proposed research, including interdisciplinary research important for the developments of science beyond the current state of knowledge.

The project impacts frontier research by developing new products and synthetic routes, formation of unique materials with tailored properties that also will be determined. The subject of the project fits the newest trends in materials and organometallic chemistry and the research project encompasses the conception of genuine synthetic strategies, which exploit well-defined and original heterosilsesquioxanes as new materials. In summary, all the interdisciplinary research planned aims at designing of **new hybrid inorganic-organic materials** based on original **smart synthetic methodology** as well as **unique properties of the final hybrid materials expected**. The tremendous possibilities of combination of different properties in one material can initiate an explosion of ideas about potential materials and their applications.